

14/91

MINISTERE AUX UNIVERSITES  
Ecole Nationale Polytechnique  
d'ALGER  
Département de Génie  
Mécanique

مدرسة متعددة التقنيات  
وزارة للجامعات  
بالجزائر

## THESE

Présentée Pour l'Obtention  
de Magister

## THEME

MODELISATION D'UNE COMBUSTION TURBULENTE  
PAR UN MODELE DE FLAMMELETTE : MODELE DE  
LA FLAMME COHERENTE

Présenté par :

Mr A. BENTEBICHE

Devant le Jury :

|                  |              |            |
|------------------|--------------|------------|
| Mr S. RECHAK     | (Prof. ENP)  | Président  |
| Mr B. BENKOUSSAS | (M.A. ENP)   | Rapporteur |
| Mr A. GAHMUSSE   | (Prof. ENP)  | Examineur  |
| Mr S. BENMANSOUR | (M.C. USTHB) | Examineur  |

JUIN 1991

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE AUX UNIVERSITES  
Ecole Nationale Polytechnique  
d'ALGER  
Département de Génie  
Mécanique

مدونة متمددة التقنيات  
وزارة للجامعات  
بالجزائر

## THESE

Présentée Pour l'Obtention  
de Magister

## THEME

MODELISATION D'UNE COMBUSTION TURBULENTE  
PAR UN MODELE DE FLAMMELETTE : MODELE DE  
LA FLAMME COHERENTE

Présenté par :

Mr A. BENTEBBICHE

Devant la Jury :

|                  |              |            |
|------------------|--------------|------------|
| Mr S. RECHAR     | (Prof. ENP)  | Président  |
| Mr B. BENKOUSSAS | (M.A. ENP)   | Rapporteur |
| Mr A. GARMOUSSE  | (Prof. ENP)  | Examineur  |
| Mr S. BENMANSOUR | (M.C. USTHB) | Examineur  |

JUIN 1991

## REMERCIEMENTS

En tout premier lieu, je tiens à remercier, monsieur le Professeur S. RECHAK qui m'a fait l'honneur d'accepter de présider le jury de cette thèse, ainsi que messieurs Pr. A. GANMOUSSE et S. BENMANSOUR pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à ce travail en participant au jury de soutenance.

J'exprime également ma gratitude, à monsieur le Professeur E. ESPOSITO de m'avoir accueilli au laboratoire E.M2.C de l'E.C.Paris et d'avoir patronner cette thèse.

Je remercie très sincèrement monsieur D.VEYNANTE de son encadrement efficace et de ses conseils éclairés.

Une mention particulière est accordée à monsieur B. BENKOUSSAS pour ses conseils et son aide dont il n'a pas hésité à m'accorder, qu'il trouve, ici, l'expression amicale de m'a plus grande gratitude.

Enfin, il me reste à remercier la direction P.N.U.D. ainsi que tout son personnel, car ce travail n'aurait pas été possible sans l'aide et l'intérêt qu'ils ont porté à cette étude.

ملخص :

يهدف عملنا هذا إلى دراسة بعض الخواص التحليلية لاحتراق اضطرابي على طريقة نماذج الشمبلات وبالخصوص على نموذج الشمبلات المنسجمة التي اقترحتها ما ريبيل و بروفورد في عام 1977. وقد استعمل هذا النموذج في حالة حيز لخيط متفاعل ذي بعدين ، بين انسيابين متوازيين انضغاطيين . إن مما دللت الانتفاظ التي تتميز الانسياب قد حلت بطريقة عددية باستعمال طريقة التقارب التتاقبي باعتبار حركية كيميائية بسيطة و خواص انتقال الجزيئات . إن النتائج المحصل عليها للشمبلات الانتشارية تنطبق مع عدة نتائج لدراسات حديثة، و قد قورنت نوعيا مع دراسة تقاربية مماثلة لانسياب غير انضغاطي .

#### ABSTRACT :

This study describes some aspects of the analysis of the turbulent combustion through out the flamelet models essentially based on the coherent flame model, initially proposed by MARBLE and BROADWELL (1977). The model is explored in the case of two-dimensional mixing layer formed between two parallel compressible flows.

The governing conservation equations are solved numerically by employing iterative method, including a simple chemical kinetics and multi-component transport properties.

Numerical results obtained for turbulent non primixed flames are in good agreement with many recent studies, and are qualitatively compared with results of similar approach for incompressible flow.

#### RESUME :

Cette étude décrit certains aspects de l'analyse d'une combustion turbulente à travers des modèles de flammelles, basé essentiellement sur le modèle de la flamme cohérente, proposé initialement par MARBLE et BROADWELL en 1977. Le modèle est exploré pour un cas de zone de mélange réactive bidimensionnelle entre deux écoulements parallèles et compressibles.

Les équations de conservation qui décrivent l'écoulement sont résolues numériquement, par une méthode itérative, en considérant une cinétique chimique simple et les propriétés de transport moléculaire adéquates.

Les résultats numériques obtenus, de cette étude pour une flamme de diffusion, sont en conformité avec plusieurs résultats récents. Ils sont comparés, qualitativement, avec les résultats d'une étude d'approche similaire d'un écoulement incompressible.

# TABLE DES MATIERES

|   |     |
|---|-----|
| LISTE DES PRINCIPALES NOTATIONS .....   | iii |
| LISTE DES FIGURES .....   | v   |
| <u>CHAPITRE I</u> - INTRODUCTION ET APERÇU BIBLIOGRAPHIQUE .....                                | 1   |
| <u>CHAPITRE II</u> - EQUATIONS DE BASE DE LA COMBUSTION .....                                   | 5   |
| 2.1- Introduction .....   | 5   |
| 2.2- Equations de bilan .....   | 5   |
| 2.3- Paramètres Thermodynamiques .....  | 8   |
| 2.4- Equations de bilan moyennes .....  | 11  |
| 2.4.1- Décomposition de Reynolds et de Favre .....  | 11  |
| 2.4.2- Bilans moyens .....  | 12  |
| 2.5- Equations de fermetures .....  | 13  |
| 2.5.1- Fermeture à longueur de mélange .....  | 15  |
| 2.5.2- Fermeture aux modèles à une ou deux équations ...  | 15  |
| 2.6- Cinétique chimique .....   | 17  |
| 2.6.1- Taux de réaction .....   | 19  |
| 2.6.2- Taux de réaction moyen .....   | 20  |
| <u>CHAPITRE III</u> - ETUDE D'UNE ZONE DE MELANGE PAR LE MODELE<br>DE LA FLAMME COHERENTE ..... | 21  |
| 3.1- Introduction .....   | 21  |
| 3.2- Equations dynamiques .....   | 21  |
| 3.3- Equation de fermetures .....   | 24  |
| 3.4- Modèle de la flamme cohérente .....  | 24  |
| 3.4.1- Modèle global .....  | 29  |
| 3.4.2- Equation de bilan pour la surface de flamme .....  | 30  |
| 3.4.3- Le modèle local .....  | 31  |
| 3.5- Adimensionnement des équations .....   | 35  |

|   |    |
|---|----|
| <b>CHAPITRE IV - SIMULATION NUMERIQUE</b> .....                       | 41 |
| 4.1- Introduction .....   | 41 |
| 4.2- Transformation des équations .....                               | 41 |
| 4.3- Le maillage .....  | 46 |
| 4.4- Méthode de résolution .....                                      | 48 |
| 4.5- Linéarisation et discrétisation des équations .....              | 51 |
| 4.5.1- Linéarisation .....  | 51 |
| 4.5.2- discrétisation .....   | 51 |
| 4.6- Conditions aux limites .....                                     | 53 |
| <br>  |    |
| <b>CHAPITRE V - ORGANISATION DE CALCUL ET RESULTATS NUMERIQUES</b> .. | 58 |
| 5.1- Introduction .....   | 58 |
| 5.2- Organisation du calcul .....                                     | 58 |
| 5.3- Description du code de calcul .....                              | 59 |
| 5.4- Résultats numériques .....                                       | 61 |
| 5.4.1- Champ de vitesse .....   | 61 |
| 5.4.2- Champ de concentrations .....                                  | 62 |
| 5.4.3- Champ de densité de surface de flamme .....                    | 62 |
| 5.4.4- Champ de température et de masse volumique .....               | 62 |
| 5.4.5- Comparaison .....  | 63 |
| <br>  |    |
| <b>CONCLUSION</b> .....   | 78 |
| <br>  |    |
| <b>ANNEXE A</b> .....   | 80 |
| <b>ANNEXE B</b> .....   | 82 |
| <br>  |    |
| <b>REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES</b> .....                              | 91 |

## LISTE DES PRINCIPALES NOTATIONS

|                  |  |
|------------------|--|
| $C_H$            | Constante dans le modèle de Prandtl-Kolmogorov |
| $C_{10}, C_{20}$ | Constantes dans le modèle K- $\epsilon$        |
| $C_p$            | Chaleur spécifique                             |
| $C_{p_i}$        | Chaleur spécifique de l'espèce i               |
| $Da$             | Nombre de Damköler                             |
| $D_k$            | Coefficient de diffusion lié à l'espèce k      |
| $E$              | Energie d'activation                           |
| $h$              | Enthalpie sensible                             |
| $h_i$            | Enthalpie spécifique de l'espèce i             |
| $I$              | Matrice unité                                  |
| $K$              | Energie cinétique turbulente                   |
| $l$              | Longueur de mélange de Prandtl                 |
| $l_m$            | Longueur de mélange de Prandtl-Kolmogorov      |
|                  | Masse molaire du mélange                       |
| $M_i$            | Masse molaire de l'espèce i                    |
| $P$              | Pression statique                              |
| $Pr$             | nombre de Prandtl                              |
| $R$              | Constante des gaz parfaits                     |
| $\nu$            | Coefficient stoechiométrique de la réaction    |
| $T$              | Température                                    |
| $T_0$            | Température initiale                           |
| $T_a$            | Température d'activation                       |
| $\tau$           | temps  |
| $U_k$            | Vitesse de diffusion de l'espèce k             |
| $u$              | Vitesse axiale suivant $ox$                    |
| $u_1, u_2$       | Vitesses axiales des réactants 1 et 2          |
| $v$              | Vitesse d'écoulement                           |
| $v_{ni}$         | Vitesse de disparition de l'espèce i           |
| $v$              | Vitesse transversale selon $oy$                |
| $\dot{\omega}$   | Taux de réaction volumique (terme source)      |
| $x$              | Coordonnée suivant $ox$                        |

|                  |   |
|------------------|---|
| $y$              | Coordonnée suivant $oy$                                     |
| $Y_k$            | Fraction massique de l'espace $k$                           |
| $\alpha, \beta$  | Constantes dans l'équation de transport de $\Sigma$         |
| $\epsilon$       | Energie de dissipation                                      |
| $\epsilon_s$     | Taux de déformation (Etirement)                             |
| $\omega$         | Energie de la pseudo-vorticité                              |
| $\dot{\omega}_k$ | Taux de réaction massique de la $k^{i\text{eme}}$ espèce    |
| $\eta$           | Coordonnée réduite $\eta = \int_0^y \rho dy'$               |
| $\lambda$        | Coefficient de conductivité thermique                       |
| $\mu$            | Viscosité dynamique   |
| $\mu_t$          | Viscosité turbulente  |
| $\mu_l$          | Viscosité laminaire   |
| $\nu$            | Viscosité cinématique                                       |
| $\rho$           | Masse volumique   |
| $\Sigma$         | Densité de surface de flamme                                |
| $\sigma_h$       | Nombre de Prandtl turbulent                                 |
| $\sigma_k$       | Nombre de Schmidt turbulent lié à l'espace $k$              |
| $\sigma_\Sigma$  | Nombre de Schmidt turbulent pour $\Sigma$                   |
| $\phi$           | Richesse réduite ( rapport d'équivalence )                  |
| $\bar{\phi}$     | Moyenne de Reynolds de la variable aléatoire $\phi(x,t)$    |
| $\tilde{\phi}$   | Moyenne de $\phi$ pondérée par la masse ( dite de Favre)    |
| $\phi', \phi''$  | Fluctuations par rapport à $\bar{\phi}$ , et $\tilde{\phi}$ |
| $\tau$           | Tenseur des contraintes visqueuses                          |
| $\tau_c$         | Temps chimique de la réaction                               |
| $\tau_t$         | Temps caractéristique de la turbulence                      |
| $\mathcal{P}$    | Tenseur des pressions.                                      |



## LISTE DES FIGURES

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 2-1 | Diagramme d'état d'un corps pur dans le système de CLAPEYRON                        | 9  |
| 2-2 | Position relative des différentes approches de la modélisation de la turbulence     | 18 |
| 3-1 | Schéma de l'écoulement et des notations utilisées                                   | 23 |
| 3-2 | Origine physique composantes du terme source de l'équation de la densité de flamme  | 26 |
| 3-4 | Schéma général de la résolution pour l'approche du type flamme cohérente            | 28 |
| 3-5 | Classification des différents type de flammes turbulentes en combustion prémélangée | 36 |
| 3-6 | Données thermodiffusives de la cinétique chimique pour une chimie complexe.         | 37 |
| 4-1 | Maillage pseudo-cartésien.  | 47 |
| 4-2 | Profils adimensionnés de vitesse d'après LOCK et GOERTHER.                          | 54 |
| 5-1 | Organigramme de calcul.   | 60 |
| 5-2 | Tableau donnant les paramètres utilisés dans la simulation numérique.               | 65 |

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 5-3-a | Evolution du profil de la vitesse axiale.   | 66 |
| 5-3-b | Evolution du profil de la vitesse transversale.   | 67 |
| 5-4-a | Evolution du profil de concentration de l'espèce 1.   | 68 |
| 5-4-b | Evolution du profil de concentration de l'espèce 2.   | 69 |
| 5-4-c | Evolution du profil de concentration des produits.  | 70 |
| 5-5   | Profils successifs de concentration du carburant, de l'oxydant, et des produits.  | 71 |
| 5-6   | Evolution du profil de densité de surface de flamme.  | 72 |
| 5-7   | Evolution du profil de température.   | 73 |
| 5-8   | Résultat numérique pour la structure de la flamme en fonction du scalaire passif.   | 74 |
| 5-9   | Evolution du profil de la masse volumique.  | 75 |
| 5-10  | Profils de concentration des espèces chimiques entre un écoulement compressible et écoulement incompressible.                               | 76 |
| 5-11  | Profils des produits, de densité de surface de flamme de température et de masse volumique en fonction de la richesse réduite $\phi$ (PHI). | 77 |

CHAPITRE I

INTRODUCTION  
ET  
APERÇU BIBLIOGRAPHIQUE

## INTRODUCTION ET APERÇU BIBLIOGRAPHIQUE

Les phénomènes de combustion présentent une importance considérable pour de très nombreux secteurs industriels, notamment dans les domaines touchant à la production d'énergie ou la propulsion de véhicules: on peut citer entre autres les fours et foyers industriels, mais aussi les moteurs à combustion interne, les réacteurs d'avion, et les moteurs, classiques ou cryogéniques, des fusées.

Pendant de longues années, le savoir-faire des ingénieurs était le seul outil, dans l'amélioration des installations utilisées dans ces domaines, appliquant ainsi des méthodes empiriques ne faisant pas appel à des modélisations physiques et chimiques complexes qui interviennent dans les phénomènes de la combustion. Ce n'est qu'à partir de la fin des années 1970, que cet aspect a commencé à évoluer, pour des raisons diverses liées au souci d'économiser l'énergie, à la préoccupation écologique, aux besoins spécifiques et compétitives de la recherche et de l'industrie de pointe.

Il est alors apparu l'intérêt de la modélisation des phénomènes physiques, de leur simulation numérique sur ordinateur pour la conception et la mise au point des moteurs ou autres produits industriels.

L'intérêt, assez particulier, qui règne sur cette étude est la contribution théorique à l'analyse de la combustion turbulente dans les zones de mélange.

L'étude de ces zones de mélange, est très intéressante sur le plan pratique, car elles interviennent dans des lieux

d'applications très divers, on peut citer comme exemple, le domaine aéronautique et spatial où ce genre de zones sont très fréquentes: le combustible est injecté dans un conduit où il rencontre l'oxydant, la flamme alors est stabilisée par une certaine géométrie sur le conduit, dans une zone de mélange où règne le panache turbulent.

Une autre utilisation porte aussi cet aspect dans le cas des lasers chimiques, où les réactants sont introduits séparément puis mélangés dans la cavité laser **Veynante /4/**.

Les connaissances dont nous disposons, sur les structures de ces zones de mélange pour un écoulement réactif turbulent sont très nombreuses. Durant les vingt dernières années un nombre considérable de travaux étaient effectués, soit pour rassembler les différents résultats classiques obtenus dans les cas des écoulements turbulents non réactifs **Schetz /5/**, **Cebeci et Bradshaw /6/**, soit pour proposer des modèles qui décrivent et permettent d'étudier au mieux, sur le plan théorique, les écoulements réactifs turbulents.

Plusieurs études ont été établies par de nombreux auteurs utilisant de différents modèles qui se distinguent entre eux par des hypothèses simplificatrices, et on remarque essentiellement les modèles basés sur le concept de flammelette:

Le modèle de la fonction de densité de probabilité utilisé par certains auteurs **Obrien /7/** et **Alber /8/**, et présenté d'une façon très détaillée par **Borghini /9/**, **Libby et Williams /10/**, **Jones et Whitelaw /11/**.

Le modèle de la flamme cohérente proposé initialement en 1977 par **Marble et Broadwell /12/** pour une flamme de diffusion turbulente, où la zone de réaction est considérée constituée d'un ensemble de flammes laminaires sous contraintes, déformés et convectés dans leur propre plan. Ce modèle a été développé par

**Darabiha** /13/ pour le cas d'une flamme turbulente en prémélange. Repris ensuite par **Sadallah** /14/ pour un cas d'écoulement axisymétrique, quant à **Veynante** /4/; il l'utilisa dans un code de calcul pour un écoulement incompressible et turbulent dans le cas où les réactants sont en diffusion.

\* \*  
\*

L'objectif de notre travail sera, ici, beaucoup plus limité. Nous cherchons à poursuivre les différents travaux initiés par les auteurs déjà cités, ceci en s'inspirant des idées de **marble** et **Broadwell** /12/, et particulièrement de celles de **Veynante** /4/, en considérant ainsi une zone de mélange, d'un écoulement réactif compressible et turbulent.

Ceci nous a amené à introduire aux équations de bilan données par **Veynante**, la masse volumique ainsi qu'une équation de conservation d'énergie, moyennant l'équation de fermeture par une équation d'état, et développé ainsi une méthode de résolution des équations aux dérivées partielles.

Ces équations écrites dans l'approximation de la couche limite sont paraboliques et l'algorithme basé sur les idées de **Blottner** /15/ ( qui utilise la méthode de Thomas), permet une résolution précise.

A cet effet, nous présentons au chapitre II une formulation générale des équations régissant un écoulement réactif turbulent et visqueux, en donnant des modèles de transport ainsi que les hypothèses qui aboutissent à un système final résolvable.

Dans le chapitre III, notre attention porte sur l'étude d'une combustion turbulente dans une zone de mélange, où nous imposons quelques hypothèses qui permettent de simplifier le

calcul, en utilisant le modèle de la flamme cohérente dans la modélisation des phénomènes physiques liés à la combustion.

Le chapitre IV est la partie consacrée à la méthode choisie de la résolution numérique, où nous donnons la discrétisation, le maillage, et l'algorithme de résolution. Les résultats de cette partie sont présentés au chapitre V par des courbes liées aux profils de champ de vitesse, de concentration des espèces chimiques, de la masse volumique ainsi que la densité de surface de flamme.

\* \*  
\*

CHAPITRE II

EQUATIONS DE BASE DE LA COMBUSTION



## CHAPITRE II

### EQUATIONS DE BASE DE LA COMBUSTION

#### 2.1- Introduction

Il est très connu que, pour un écoulement de fluide réactif et turbulent, seule la résolution des équations de bilan permet l'obtention des champs de vitesse, de température, ainsi que les fractions massiques des espèces chimiques. Nous allons dans ce chapitre établir les équations généralisées de bilan et poser des hypothèses simplificatrices nécessaires à leur résolution.

Pour résoudre ces équations de bilan, tout en tenant compte des phénomènes de turbulences et de combustion, nous ferons recours à des modélisations classiques, car jusqu'à présent ce sont pratiquement les seules méthodes utilisées à grand nombres de travaux récents, vu les limites actuelles des systèmes informatiques pour utiliser d'autres méthodes.

#### 2.2- Equations de bilan

Les équations de bilan que nous présentons sont les équations de la conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie, et des espèces chimiques, **Williams /2/**, **Borghini /9/**, **Lacas /26/**. Elles s'écrivent sous la forme compacte suivante:

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla (\rho V) = 0 \quad (2.1)$$

Avec  $\rho$  la masse volumique,  
 $V$  la vitesse de l'écoulement et ,  
 $t$  le temps.

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = - \nabla \Phi \quad (2.2)$$

Où  $\Phi$  est le tenseur des pressions, qui peut se décomposer en deux termes distincts :

$$\Phi = p I + \tau \quad (2.3)$$

Avec  $p$  la pression,  $\tau$  le tenseur des contraintes visqueuses, et  $I$  la matrice identité d'ordre 3.

Pour simplifier la résolution du système, nous considérons dans cette étude quelques hypothèses, et en premier lieu celle d'un fluide Newtonien, ce qui permet d'écrire le tenseur des contraintes visqueuses en fonction du gradient de vitesse telque:

$$\tau = \frac{2}{3} \mu_L (\nabla \cdot V) I - \mu_L (\nabla \cdot V + (\nabla \cdot V)^T) \quad (2.4)$$

Où  $\mu_L$  est la viscosité dynamique laminaire, grandeur intrinsèque connue du fluide considéré, et l'exposant  $T$  désigne la transposée. En utilisant (2.4), l'équation (2.2) peut s'écrire :

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla p I - \nabla \left[ \frac{2}{3} \mu_L (\nabla \cdot V) I - \mu_L (\nabla \cdot V + (\nabla \cdot V)^T) \right] \quad (2.5)$$

Conservation des espèces chimiques :

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} Y_k + \rho (V \cdot \nabla) Y_k = -\nabla \cdot (\rho Y_k U_k) + \dot{\omega}_k \quad k=1,N \quad (2.6)$$

Où  $Y_k$  est défini comme étant la fraction massique de l'espèce  $k$ , et  $U_k$  sa vitesse de diffusion.  $\dot{\omega}_k$  est le terme source de la  $k^{\text{ième}}$  espèce qui est dû seulement aux réactions chimiques.

La vitesse de diffusion de l'espèce  $k$  peut être exprimer par la loi empirique de Fick :

$$U_k = -D_k \frac{1}{Y_k} \nabla \cdot Y_k \quad k=1,N \quad (2.7)$$

$D_k$  est le coefficient de diffusion lié à chaque espèce  $k$ .

On définit aussi un nombre sans dimension appelé nombre de Schmidt tel que :

$$\sigma_k = \frac{\nu_\ell}{\rho D_k} \quad (2.8)$$

Ce qui rend l'équation (2.6) sous la forme suivante:

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} Y_k + \rho (\mathbf{V} \cdot \nabla) Y_k = \nabla \cdot \left[ \frac{\nu_\ell}{\sigma_k} \nabla Y_k \right] + \dot{\omega}_k \quad k=1, N \quad (2.9)$$

#### Conservation de l'énergie :

Nous exprimons la conservation de l'énergie par l'équation de bilan d'enthalpie sensible :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho (\mathbf{V} \cdot \nabla) h = \nabla \cdot \frac{\lambda}{C_p} \nabla h + \frac{\partial p}{\partial t} + \dot{\omega}_h \quad (2.10)$$

Où  $\lambda$  est le coefficient de conductivité thermique,  $C_p$  la chaleur massique du mélange, et  $\dot{\omega}_h$  le terme source lié à l'enthalpie.

On définit l'enthalpie sensible du mélange par :

$$h = \int_{T_0}^T C_p dT \quad (2.11)$$

Le nombre de Prandtl est un nombre adimensionné qui relie  $\nu_\ell$  et  $\lambda/C_p$ , définit comme :

$$Pr = \frac{\nu_\ell}{\lambda/C_p} \quad (2.12)$$

D'où l'expression du bilan d'enthalpie:

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho (\mathbf{V} \cdot \nabla) h = \nabla \cdot \left[ \frac{\nu_\ell}{Pr} \nabla h \right] + \frac{\partial p}{\partial t} + \dot{\omega}_h \quad (2.13)$$

### 2.3- Paramètres thermodynamiques

Les équations de bilan que nous venons de présenter pour un écoulement de fluides réactifs sont complétées par une équation de fermeture, de la masse volumique  $\rho$ , en fonction de la pression  $p$ , et à la température  $T$  telque :

$$\rho = f(p, T)$$

La combustion influence les paramètres thermodynamiques du mélange utilisé, ce qui nécessite une prise en compte des paramètres d'état d'éléments purs qui constitues le mélange global, ceci au voisinage de leur points critiques  $C$ , figure 2-1.

Nous supposerons, ici, que la combustion ne fait pas intervenir des changements de phases des corps purs dans le mélange considéré, et qu'il vérifie l'hypothèse des gaz denses.

#### Equation d'Etat :

L'équation d'etat, que nous avons adopté dans cette étude, est l'équation des gaz parfaits :

$$p = R T / V_m \quad (2.14)$$

Avec,  $V_m = M/\rho$

$V_m$  étant le volume molaire,  $R$  la constante universelle des gaz parfaits,  $T$  la température, et  $M$  la masse molaire du mélange.

Le choix de cette équation est lié à l'hypothèse des gaz denses ce qui signifie que le mélange est loin du point critique  $C$ , et que ses constituants se comportent comme des gaz parfaits.

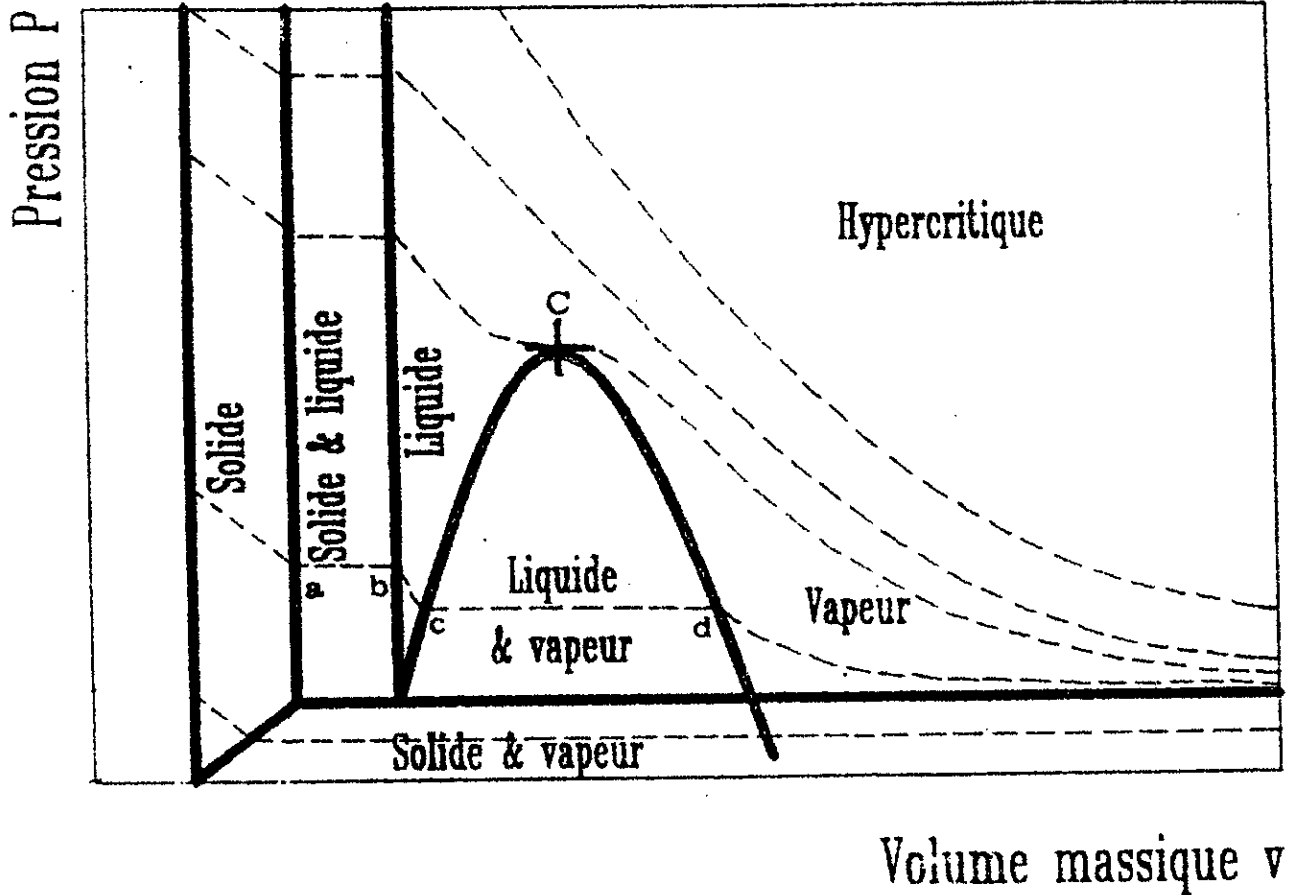


Figure 1.17 Diagramme d'état d'un corps pur dans le système de coordonnées de Clapeyron ( $p-v$ ). C est le point critique, les lignes pointillées correspondent à des isothermes. Les traits épais représentent les lignes de changement de phase.

ceci nous amène à écrire :

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{M_i} \quad (2.15)$$

Où  $Y_i$  et  $M_i$  désignent respectivement, la fraction massique et la masse molaire de l'espèce  $i$ .

La masse molaire du mélange étant :

$$\frac{1}{M} = \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{M_i} \quad (2.16)$$

### Enthalpie du mélange :

L'enthalpie du mélange des  $n$  espèces chimiques est donnée par :

$$h = \sum_{i=1}^n Y_i h_i \quad (2.17)$$

$h_i$  est enthalpie spécifique de l'espèce  $i$ , qui est exprimée en fonction de  $C_{p_i}$  et de  $h_i^\circ$ , telque :

$$h_i = \int_{T_0}^T C_{p_i} dT + h_i^\circ \quad (2.18)$$

Où  $h_i^\circ$  est l'enthalpie de formation à la température de référence  $T_0$ .

Finalement, l'enthalpie du mélange  $h$  peut se mettre sous la forme:

$$h = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{i=1}^n Y_i h_i^\circ \quad (2.19)$$

Avec,

$$C_p = \sum_{i=1}^n Y_i C_{p_i} \quad (2.20)$$

Aussi, nous choisissons, pour le calcul des chaleurs massiques de chaque espèce  $i$ , la méthode classique des fonctions polynômiales par morceaux, la valeur de  $C_{p_i}$  d'ordre 3 sera donnée par :

$$C_{p_i} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + \dots \quad (2.21)$$

les coefficients  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  et  $d_i$  sont des constantes tabulées liées à l'espèce  $i$ . Nous négligeons, ici, les termes supérieurs à l'ordre 3, car l'erreur due par cette approche est très négligeable.

## 2.4 - Equations de bilan moyennes

### 2.4.1 - Décomposition de Reynolds et de Favre

Dans les écoulements turbulents, les variables des équations de bilan varient rapidement avec le temps se qui leur donne des formes aléatoires et fluctuantes.

Pour analyser ce type d'écoulement, on utilisera une méthode classique qui consiste à décomposer chaque variable dépendente à des composantes moyenne et fluctuante. Ainsi les équations de bilan décrivant les variations de composantes moyennes sont obtenues, faisant apparaître des corrélations des composantes fluctuantes.

Pour compléter la description de l'écoulement moyen, des hypothèses de fermetures sont introduites, comme celle de **Kolmogorov** /37/ qui permet d'écrire la décomposition de Reynolds pour toute quantité  $\phi$  sous la forme:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (2.22)$$

Où  $\phi(x,t)$  est une variable aléatoire qui peut être  $V$ ,  $h$ ,  $T$ ,  $Y_k$ , ...etc,  $\bar{\phi}$  la moyenne d'ensemble de cette variable, et  $\phi'$  sa

fluctuation telque :

$$\bar{\phi} = \frac{1}{\mathcal{T}} \int_{t-\mathcal{T}/2}^{t+\mathcal{T}/2} \phi(x,t) dt \quad (2.23)$$

et,

$$\bar{\phi}' = 0$$

La durée  $\mathcal{T}$  doit être suffisamment grande par rapport aux périodes caractéristiques des fluctuations de l'écoulement et suffisamment petite par rapport au temps caractéristique des quantités moyennes.

Dans le cas d'écoulements réactifs compressible où les apports de chaleur développent d'importants écarts de densité, on préfère remplacer les moyennes de Reynolds par des moyennes ponderés par les masses (Favre /18/, Bilger /19/), on a alors :

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.24)$$

telque:

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho \phi}}{\bar{\rho}}$$

Où  $\tilde{\phi}$  est la moyenne de  $\phi$  dite de Favre, et  $\phi''$  sa fluctuation. Ce qui permet, avec cette nouvelle définition de la moyenne, de prendre mieux en compte les variations de la masse volumique  $\rho$  dans les équations de bilans.

#### 2.4.2- Bilans moyens

Nous reportons la définition de la moyenne dans les équations de bilan instantanées, on obtient alors les équations de bilan moyennées, comme ont été donné par Borghi /9/, Libby et Williams /10/, sous la forme indicielle suivante :

Continuité:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} + \frac{\partial}{\partial x_l} \bar{\rho} \tilde{u}_l = 0 \quad \begin{matrix} l=1, 2 \\ j=1, 2 \end{matrix} \quad (2.25)$$



Quantité de mouvement:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{u}_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} \right] = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \nu_t \left[ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} I \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} \quad (2.26)$$

L'enthalpie:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{h} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h} + \bar{\rho} \widetilde{u_j'' h''} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\nu_t}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{\omega}_h \quad (2.27)$$

Espèces chimiques:

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{Y}_k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k + \bar{\rho} \widetilde{u_j'' Y_k''} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right] + \tilde{\omega}_v \quad (2.28)$$

$k = 1, n$

Le recours à la modélisation consiste à estimer les termes du second ordre :  $-\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}$ ,  $-\bar{\rho} \widetilde{u_j'' h''}$ , et  $-\bar{\rho} \widetilde{u_j'' Y_k''}$  respectivement les flux turbulents de la quantité de mouvement, d'enthalpie, et de la diffusion des espèces chimiques  $k$ . Connaissant les expressions de ces termes du second ordre, le système d'équations constitué plus haut peut être fermé.

Parmi les classes de solutions possibles de ces termes, on utilise les hypothèses de fermetures pour les modèles à tension de Reynolds ( $\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}$ ), appelés aussi modèles du second ordre, qui sont les mieux adaptées au calcul d'écoulements fortement anisotropes telles que les couches limites turbulentes.

### 2.5- Equations de fermetures

Les équations de fermetures permettent la détermination des flux turbulents de quantité de mouvement, d'enthalpie, et d'espèces chimiques. Dans ce paragraphe, nous présenterons les

modèles qui permettent de calculer les termes du second ordre. Ces modèles sont basés sur le concept de viscosité turbulente de "Boussinesq", Jones /39/, et Rodi /40/.

On considèrera, en premier lieu, le flux turbulent de quantité de mouvement ( contraintes de Reynolds )  $\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}$ , qui va être transformé en une forme proche de celle écrite pour l'expression du tenseur des contraintes visqueuses (2.4), ainsi on conservera une structure comparable à celle de l'équation de bilan.

Les contraintes de Reynolds sont calculées à partir de relation liant le taux de déformation et l'énergie cinétique turbulente.

$$\bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''} = - \mu_t \left[ \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right] + \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{\rho} \tilde{K} \quad (2.29)$$

Avec, 
$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i=j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Où  $\mu_t$  représente la viscosité turbulente et  $\tilde{K}$  l'énergie cinétique turbulente définie par :

$$\tilde{K} = \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} \quad (2.30)$$

Le flux turbulent d'enthalpie et le flux turbulent des espèces chimiques sont donnés d'une façon analogue sous la forme :

$$-\bar{\rho} \widetilde{u_j'' h''} = \frac{\mu_t}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \quad (2.31)$$

$$-\bar{\rho} \widetilde{u_j'' Y_k''} = \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (2.32)$$

Où  $Pr$  et  $\sigma_k$  sont respectivement le nombre de Prandtl turbulent, et le nombre de schmidt turbulent.

Pour compléter les relations précédentes, il faut rajouter une autre méthode qui permet d'estimer la viscosité turbulente  $\mu_t$ .

### 2.5.1- Fermeture à longueur de mélange (Prandtl)

Cette méthode consiste à utiliser un modèle de longueur de mélange dit de Prandtl, qui relie la viscosité turbulente  $\mu_t$  aux échelles de la longueur et de vitesse de la turbulence telque:

$$\mu_t = \bar{\rho} \tilde{K}^{1/2} l_m \quad (2.33)$$

Où l'énergie cinétique turbulente  $\tilde{K}$  est calculée à l'aide du taux de déformation moyen :

$$\tilde{K} = l_m^2 k_1 \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (2.34)$$

On substitue (2.33) dans (2.34) on aura l'expression suivante:

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 k_2 \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.35)$$

Où,  $l_m$  est une longueur caractéristique de la turbulence et  $k_1, k_2$  sont des constantes, alors le problème se reporte sur l'estimation de  $l_m$ . Dans des configurations simples, il est possible de trouver des lois empiriques de variation de  $l_m$  (Cebeci /20/, Balwin /21/), mais pour les cas complexes ces méthodes restent très limitées.

### 2.5.2- Fermeture aux modèles à une ou deux équations

L'amélioration du modèle de longueur de mélange a donnée un autre modèle à une équation appelé modèle de Prandtl-Kolmogorov où on pose :

$$\mu_t = C_\mu l^2 \sqrt{\frac{\tilde{K}}{L}} \quad (2.36)$$

Avec,  $C_\mu$  est une constante qui vaut 0.09, et L une longueur référencielle.

La détermination de  $\tilde{K}$  se fait à l'aide d'une équation de transport pour la quantité  $\tilde{K}$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{K} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{K} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_l + \mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{K}}{\partial x_j} \right] + \tilde{\omega}_k \quad (2.37)$$

Où  $\tilde{\omega}_k$  est le terme source d'énergie cinétique, et  $\sigma_k$  le nombre de Schmidt égal à 1.

Il est très fréquent, d'introduire un système à deux équations de bilan permettant de calculer l'énergie de dissipation  $\varepsilon$  de l'énergie cinétique qui intervient dans le terme source  $\tilde{\omega}_k$ , et l'énergie cinétique  $\tilde{K}$  :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{K}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{K} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_l + \mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{K}}{\partial x_j} \right] + C_\mu \frac{\tilde{K}^2}{\varepsilon} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - \bar{\rho} \varepsilon \quad (2.38)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\mu_l + \mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} C_\mu \tilde{K} \left( \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{\tilde{K}} \quad (2.39)$$

Avec, 
$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{K}^2}{\varepsilon} \quad (2.40)$$

On donne les valeurs des constantes :

$$C_\mu = 0.09, \quad C_{1\varepsilon} = 1.44, \quad C_{2\varepsilon} = 1.92, \quad \sigma_k = 1., \quad \sigma_\varepsilon = 1.3$$

C'est ce type de fermeture à deux équations qui sont actuellement les plus utilisés et dont on trouve les modèles telque :

- Le modèle de K- $\varepsilon$  (celui présenté en haut (2.38) à (2.40))
- Le modèle de Saffman.

Saffman fait intervenir au lieu de la dissipation d'énergie cinétique, une quantité  $\omega^2$  correspondant à une pseudo-vorticité.

Alors les équations de saffman sont :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{K}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{K} \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\nu_l + \nu}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{K}}{\partial x_j} \right] + \alpha \tilde{K} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \tilde{\omega} \tilde{K} \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\omega}^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{\omega}^2 \right] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\nu_l + \nu}{\sigma_\omega} \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial x_j} \right] + \alpha \tilde{\omega}^2 \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \beta \tilde{\omega}^2 \quad (2.42)$$

Avec, 
$$\nu_l = \bar{\rho} C_\mu \frac{\tilde{K}}{|\tilde{\omega}|} \quad (2.43)$$

Ces deux derniers modèles ne nécessitent pas des spécification d'une longueur de mélange  $l_m$ , mais le fait qu'ils prennent l'hypothèse de l'isotropie de la turbulence liée à la définition de  $\tilde{K} = \frac{1}{2} (\tilde{u}_i')^2$  rend leurs utilisations très restreintes dans les zones de recirculation où l'écoulement est anisotrope (au voisinage d'une paroi), **Lacas /26/, Darabiha /13/.**

Ces différentes approches sont rassemblées dans la figure 2-2.

## 2.6.- Cinétique chimique (Termes source)

Les équations de bilan moyennées présentés jusqu'ici, qui décrivent l'écoulement réactif turbulent font apparaitre des termes sources  $\dot{\omega}_h$ ,  $\dot{\omega}_y$  qui dépendent des concentrations des n espèces chimiques, des températures et des caractéristiques mécaniques de l'écoulement: gradients de vitesse, étirement, intensité de la turbulence. Ces couplages entre ces grandeurs sont à la base de tous les problèmes de la combustion turbulente. Donc il s'agit, par la modélisation de donner une estimation valable des termes sources  $\dot{\omega}_h$  et  $\dot{\omega}_y$ .

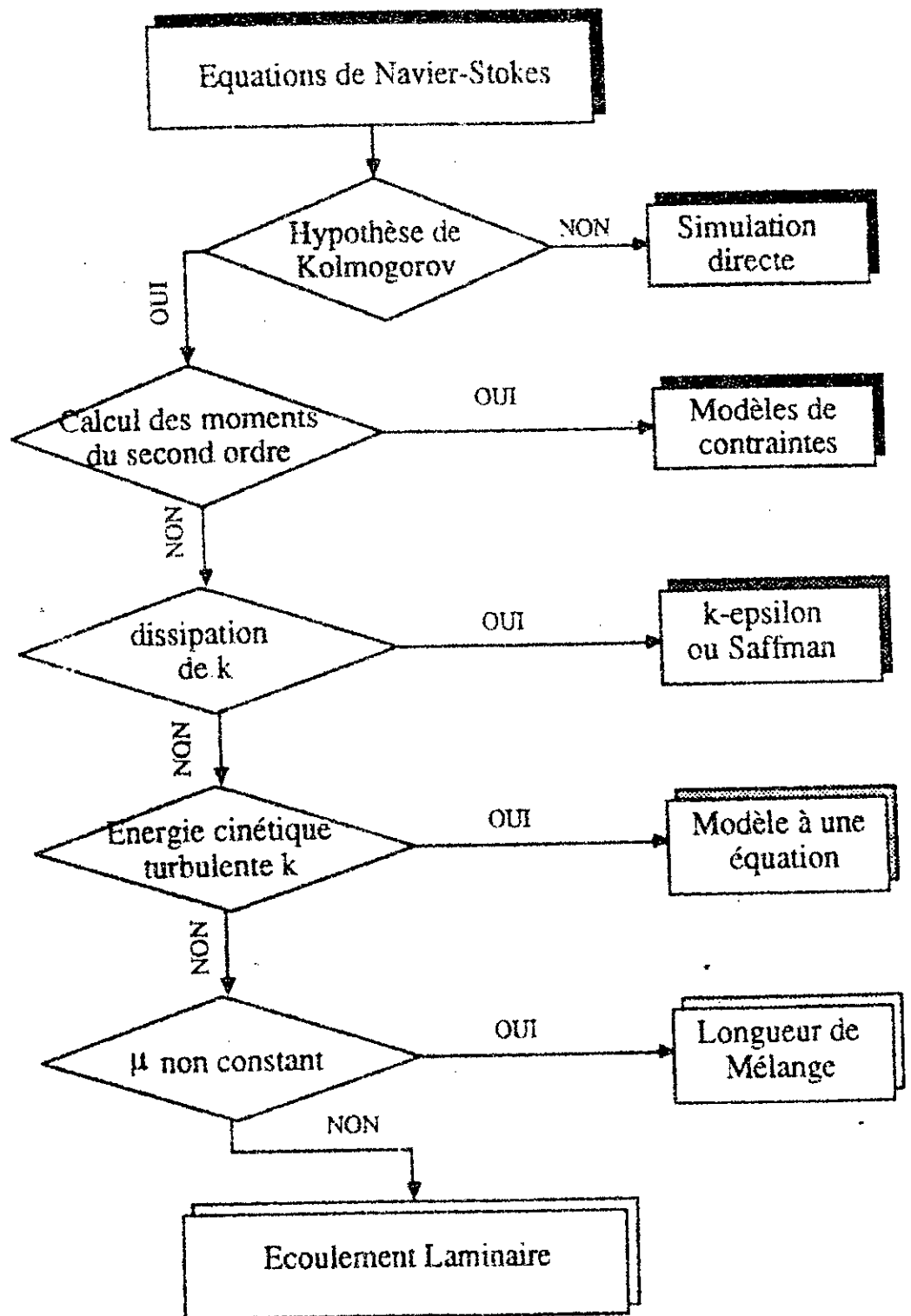


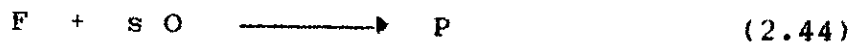
Figure 4.23 Position relative des différentes approches de la modélisation de la turbulence en fonction de leurs hypothèses génératrices.

( Tiré de Lacas /26/ ).

Un nombre d'études ont établi les différentes approches possibles pour l'estimation de ces termes en tenant compte des couplages thermo-chimique et physique (mécanique) d'une façon adéquate, Libby et Williams /10/, Borghi /9/, Darabiha /13/.

### 2.6.1- Taux de réaction

Nous allons considérer une réaction chimique simple qui fait intervenir le combustible F, l'oxydant O, et les produits de la réaction P et qui s'écrit sous la forme :



s est le coefficient stoechiométrique de la réaction, qui est défini par le rapport des coefficients stoechiométriques molaires de l'oxydant  $\nu_O$  et celui du fuel  $\nu_F$  tel que:

$$s = \nu_O / \nu_F$$

Nous supposons que la réaction (2.44) est irréversible, alors on peut écrire le taux de disparition molaire de fuel par unité de volume par une expression du type Arrhénius telque:

$$R_F \equiv dn_F/dt = - B T^a \exp(-T_A/T) \quad (2.45)$$

Où  $n_F$  est la concentration molaire de fuel (combustible) ;

( $T_A = E/R$ ) est la température d'activation de réaction ;

E énergie d'activation et R constante des gaz parfaits ;

B un facteur pré-exponentiel ;

a est un exposant caractérisant l'évolution du facteur B en fonction de la température.

Le taux de disparition (taux de réaction) massique de fuel par unité de volume est donné par:

$$\dot{\omega}_F = M_F R_F \quad (2.46)$$

$$\dot{\omega}_F = \rho \dot{w}_F \quad (2.47)$$

$\dot{w}_F$  désigne le taux de réaction massique de fuel par unité de masse parfois, il est utile de faire apparaître, les fractions massiques de fuel F et de l'oxydant O, alors le taux de réaction massique s'écrit:

$$\dot{w}_F = \frac{\rho B}{M_F M_O} T^a Y_F Y_O \exp(-E/RT) \quad (2.48)$$

On peut déduire le taux de réaction de l'oxydant O à partir de la relation :

$$\dot{w}_O = \frac{s M_O}{M_F} \dot{w}_F \quad (2.49)$$

$$\dot{w}_O = s \frac{\rho^2 B}{M_F M_O} T^a Y_F Y_O \exp(-E/RT) \quad (2.50)$$

Où  $M_F, M_O$  sont respectivement la masse molaire du fuel et celle de l'oxydant.

### 2.6.2- Taux de réaction moyen

Le calcul des taux de réaction moyens  $\bar{\dot{w}}_\phi$ , occupe une position centrale en combustion turbulente. Il est formulé essentiellement par des techniques utilisées par différents auteurs telques **Spalding** /35/, **Borghini** /9/, **Williams** /2/.

Nous citons ici trois méthodes différentes:

- \* Méthode de la fonction de densité de probabilité (p.d.f).
- \* méthode du modèle "Eddy Break Up" (EBU).
- \* Méthode du modèle de la flamme cohérente (C.F.M.).

Les deux premières méthodes seront explicitées brièvement en annexe A, par contre la troisième méthode qui est l'objet de cette étude, sera détaillée au chapitre suivant.



CHAPITRE III

ETUDE D'UNE ZONE DE MELANGE  
PAR LE MODELE DE LA FLAMME COHERENTE

## CHAPITRE III

### ETUDE D'UNE ZONE DE MELANGE PAR LE MODELE DE LA FLAMME COHERENTE

#### 3.1- Introduction

Dans le chapitre précédent, on a montré que les équations de bilan décrivant une combustion turbulente peuvent être résolues si quelques hypothèses très simples sont posées.

Dans cette partie, nous présentons une étude théorique d'une zone de mélange réactive entre deux écoulements bidimensionnels de vitesses  $u_1$  et  $u_2$ , figure 3-1.

En premier lieu, nous formulons les équations régissant les écoulements gazeux réactifs et turbulents, par des approximations classiques de la couche limite bidimensionnelle, pour l'établissement des équations dynamiques, et moyennant la fermeture de Saffman.

Au second, le modèle de la flamme cohérente est utilisé, d'une part, pour l'étude de la réaction chimique et d'autre part pour la détermination des taux de réactions moyens.

#### 2.2- Equations dynamiques ( couche limite )

A l'aide de l'approximation de la couche limite, l'écoulement bidimensionnel le long d'une plaque mince, reste très convenablement décrit, et les équations du mouvement deviennent paraboliques, Cobeci et Bradshaw /6/ Veynante /4/. Ces équations prennent, dans le cas du régime stationnaire, la forme suivante :

Equation de continuité:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\bar{\rho} \tilde{u}) + \frac{\partial}{\partial y}(\bar{\rho} \tilde{v}) = 0 \quad (3.1)$$

Equation de quantité de mouvement:

$$\bar{\rho} \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \bar{\rho} \tilde{v} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ (\mu_t + \mu_l) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right] \quad (3.2)$$

Où,  $\tilde{u}$  et  $\tilde{v}$  sont les composantes de la vitesse d'écoulement, et qui désignent respectivement la vitesse axiale, et la vitesse transversale.

Ces équations ont été établies en imposant quelques hypothèses dont on rappelle essentiellement que:

- 1- L'écoulement compressible est statiquement stationnaire, et bidimensionnel.
- 2- La vitesse transversale moyenne  $\tilde{v}$  est très petite devant la vitesse axiale  $\tilde{u}$  ( direction privilégiée  $x \rightarrow \tilde{v} \ll \tilde{u}$  ).
- 3- L'écoulement est libre ( loin des parois ), et que la pression statique  $\bar{p}$  est supposée constante (  $\partial \bar{p} / \partial x = 0$ ,  $\partial \bar{p} / \partial y = 0$  ).
- 4- Compte tenu de la direction privilégiée de l'écoulement, le transfert diffusif dans le sens des  $x$  sera négligé.

On imposera alors, les conditions aux limites, dans le cas de la couche de mélange libre:

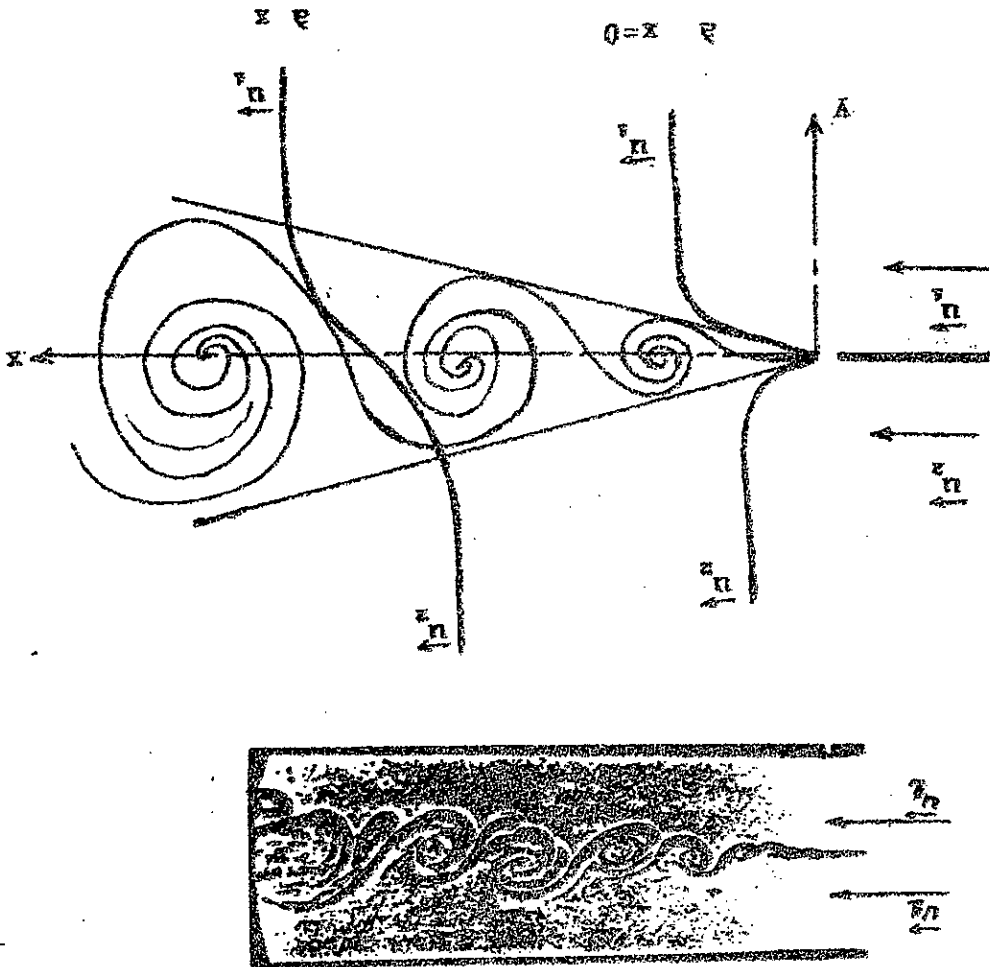
$$\lim_{y \rightarrow +\infty} \tilde{u} = u_2 \quad (3.3)$$

$$\lim_{y \rightarrow -\infty} \tilde{u} = u_1 \quad (3.4)$$

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \partial \tilde{u} / \partial y = 0 \quad (3.5)$$

$$\lim_{y \rightarrow \pm\infty} \partial \tilde{v} / \partial y = 0 \quad (3.6)$$

Figure 3-1: Schéma de l'écoulement et des notations utilisées avec  $u^2 > u^1$ .



### 3.3- Equations de fermetures

Les équations de fermetures que nous avons déjà vu, seront écrits dans le cas bidimensionnel, et moyennant les hypothèses cités précédemment.

Le terme de la viscosité turbulente donnée dans (3.2), nécessaire pour le calcul des contraintes de Reynolds est défini par le modèle de Saffman par:

$$\mu_t = \bar{\rho} A \frac{\tilde{K}}{|\tilde{\omega}|} \quad (3.7)$$

Avec,  $A=C_u = 0.09$

$\omega$  et  $K$  sont respectivement la pseudo-vorticité et l'énergie cinétique turbulente, et s'expriment sous la forme:

$$\bar{\rho} u \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial x} + \bar{\rho} v \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \bar{\rho} \left( \frac{\mu_t + \mu_l}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial y} \right] + \alpha' \bar{\rho} \tilde{\omega}^2 \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right| - \beta' \bar{\rho} \tilde{\omega}^3 \quad (3.8)$$

$$\bar{\rho} u \frac{\partial \tilde{K}}{\partial x} + \bar{\rho} v \frac{\partial \tilde{K}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \bar{\rho} \left( \frac{\mu_t + \mu_l}{\sigma_K} \right) \frac{\partial \tilde{K}}{\partial y} \right] + \alpha' \bar{\rho} \tilde{K} \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right| - \beta' \bar{\rho} \tilde{K} \tilde{\omega} \quad (3.9)$$

Saffman donne  $\sigma_\omega = \sigma_K = 2.$ , qui sont le nombre de Schmidt turbulent de diffusion du carré de la pseudo-vorticité  $\omega^2$  et de l'énergie cinétique  $K$ .

### 3.4- Modèle de la flamme cohérente

Le modèle de la flamme cohérente, développé initialement en 1977 par Marble et Broadwell /12/, constitue une voie nouvelle dans l'approche reposant sur le concept de flammelettes décrit par Libby et Williams /10/. Ce modèle a été développé pour des flammes non prémélangées par les auteurs initiateurs et, par Veynante /4/. Aussi, il a été étendu au cas des flammes prémélangées Darabina et al /24/.

Le modèle repose sur l'analyse de la réaction chimique au sein d'une structure cohérente, et il représente l'interaction des tourbillons présents dans une zone de mélange avec celle où

se produit la réaction chimique. Les chercheurs ont pu décomposer la zone de combustion turbulente en une collection de flammes laminaires dont la structure est identifiable. Ces éléments de flammes laminaires sont déformés et convectés par l'écoulement turbulent, tout en conservant leur parfaite identité.

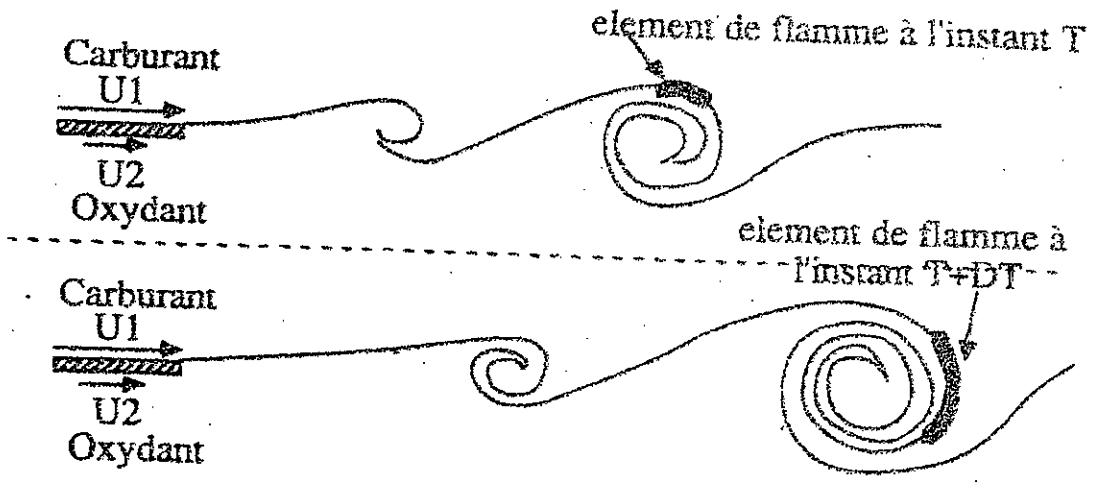
Les éléments de flamme, supposés infiniment minces, se situent à l'interface entre les deux réactants. Marble et Broadwell ont introduit la notion de surface de flamme qui subit un taux de déformation dans son propre plan, après sa mise en rotation et translation dans l'écoulement, ceci rend l'élément étiré, et voire même, sa surface croître.

Un autre mécanisme important constaté par ces deux chercheurs est celui de rétrécissement de surface de flamme, dans l'enroulement d'un tourbillon jusqu'à annihilation complète de deux fronts de flamme adjacents et disparition du réactif qui les séparait, voire, aussi même l'extinction de la flamme due à l'interposition de produits entre les deux réactifs, figure 3-2, et figure 3-3.

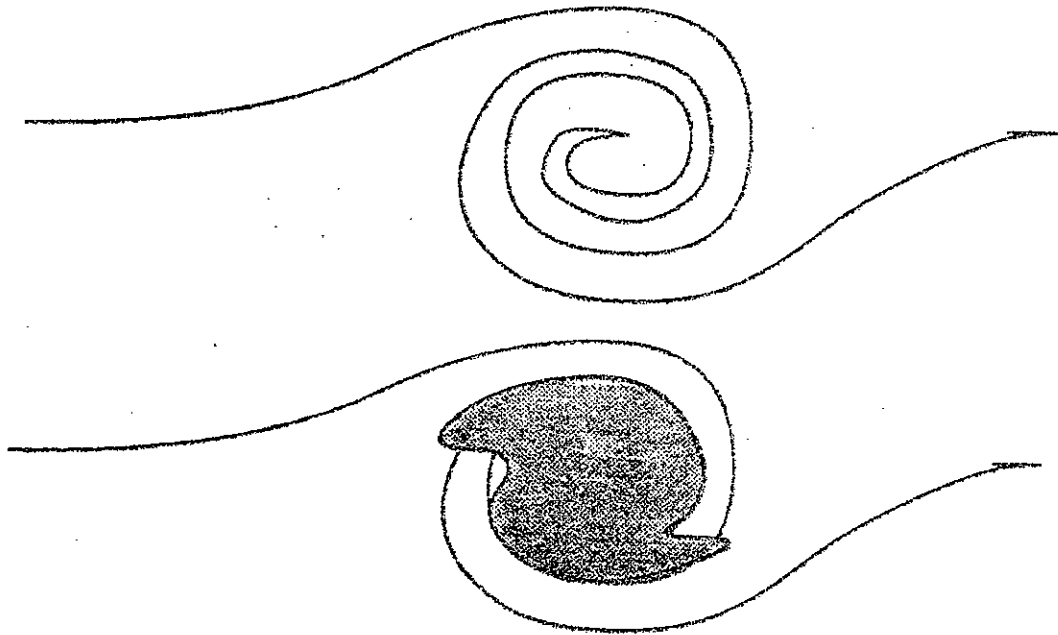
La modélisation du type flamme cohérente se résume généralement en trois points:

- Un modèle global de l'écoulement turbulent qui décrit la conservation de masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques, introduisant les équations de fermetures.
- Un modèle local pour le calcul de la flamme laminaire étirée donnant le taux de réaction moyen par unité de surface de flamme, et les phénomènes de transport moléculaires.
- Une équation de bilan qui lie le modèle global au modèle local, en donnant la densité de surface de flamme, figure 3-4.

Nous allons dans ce qui suit donner la modélisation globale devant permettre à résoudre les équations de bilan, et nous décrirons en suite, le modèle local qui fournit les données de base sur les flammes laminaires étirées.

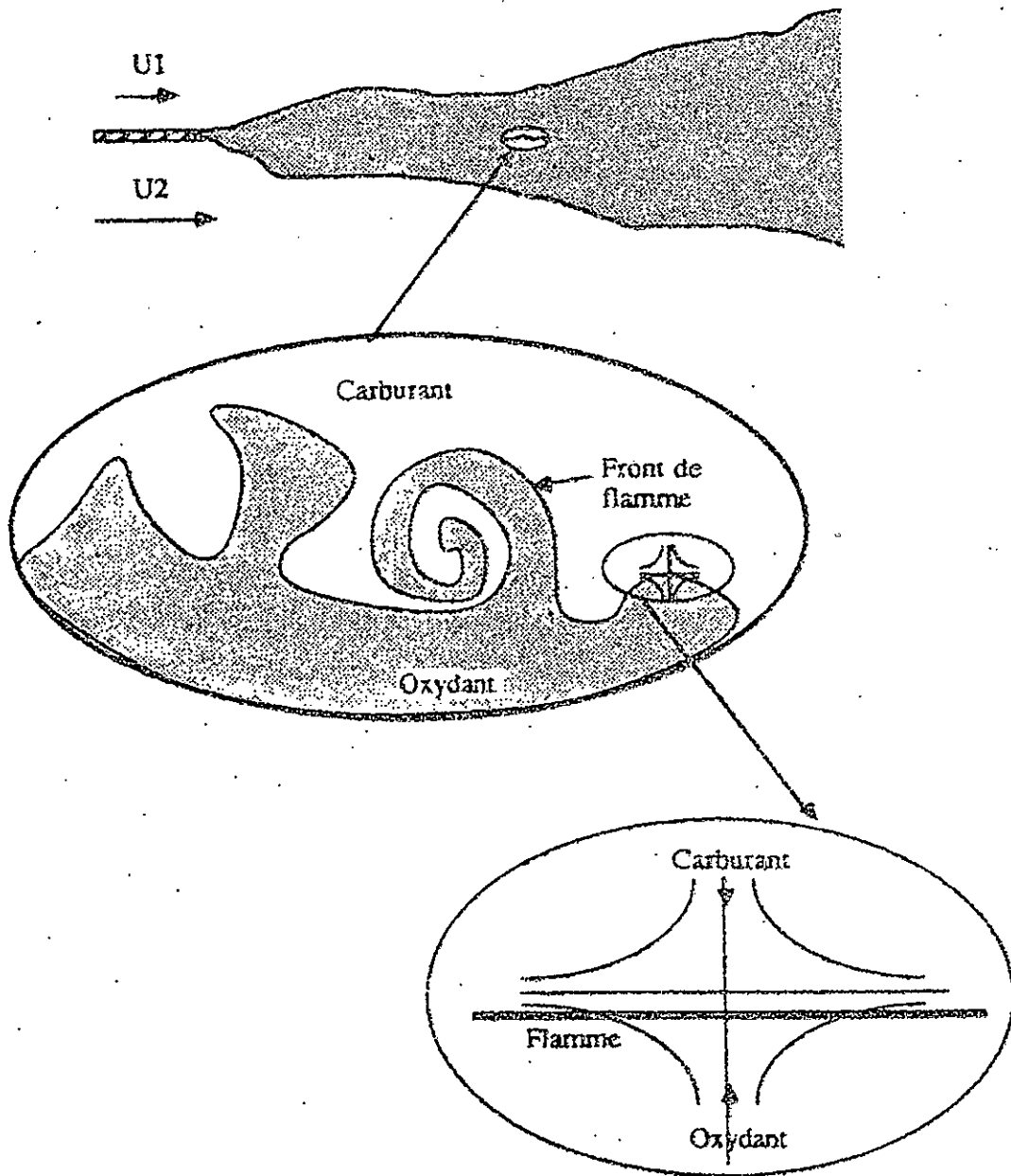


a- Etirement du front de flamme par l'écoulement



b- disparition des tourbillons par annihilation mutuelle

Figure 3-2: Origine physique des différentes composantes du terme source de l'équation de bilan de la densité de surface de flamme: Création due à l'étirement, disparition par annihilation des tourbillons.



**Figure 3-3:** Schéma du principe du modèle de flamme cohérente. On calcule la quantité d'interface entre les réactifs, puis la structure de la flamme est analysée autour de cette interface.



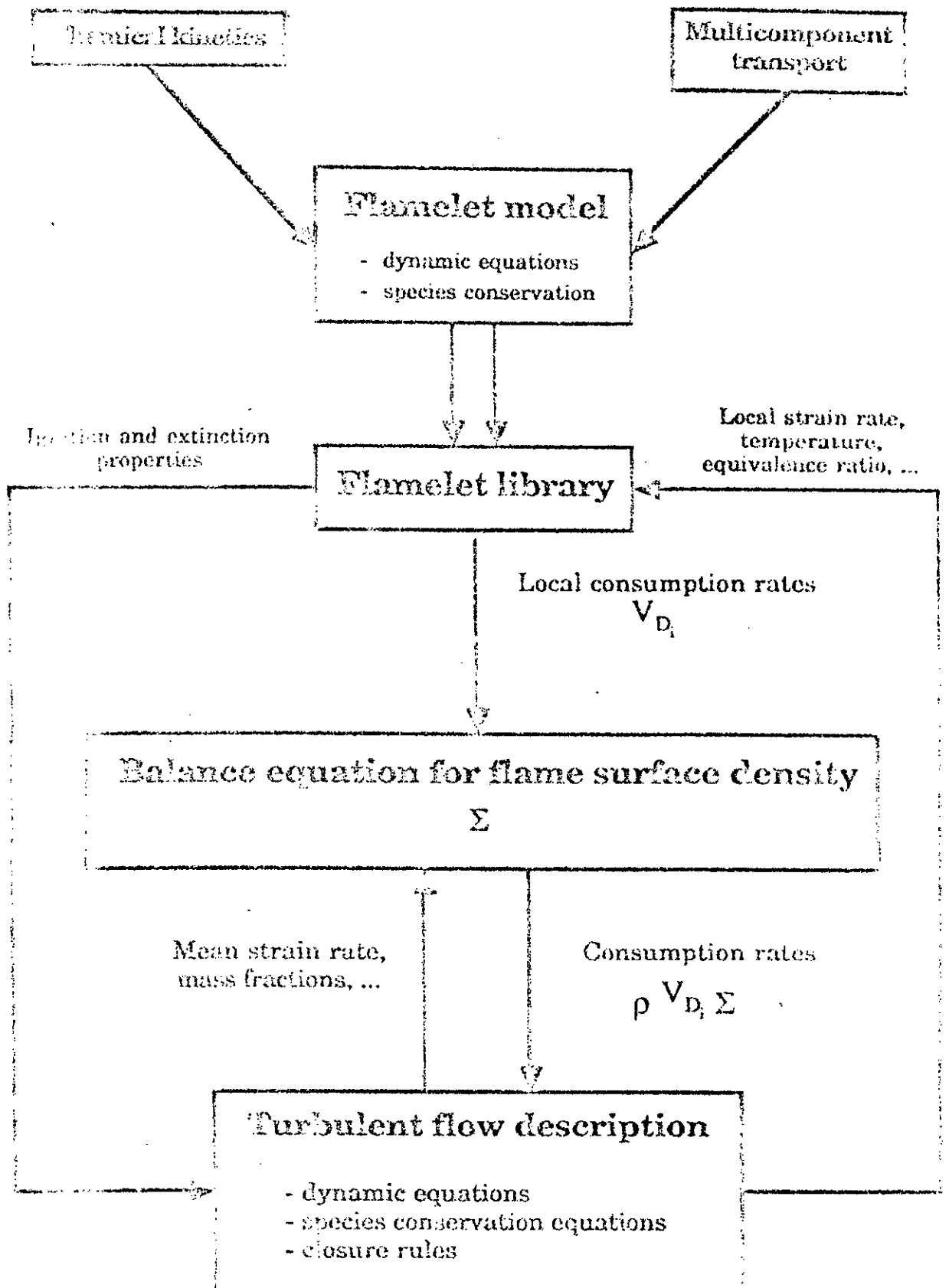


Figure 3-4: Schéma général de la résolution pour l'approche du type flamme cohérente.

3.4.1- Modèle global

Le système des équations de bilan pour l'enthalpie et les concentrations massiques des espèces chimiques tel qu'il a été définie précédemment dans (2.27), et (2.28), s'écrit dans le cadre des hypothèses prises pour cette étude (approximation de la couche limite) de la façon suivante:

$$\bar{\rho} \tilde{u} \frac{\partial}{\partial x} (\tilde{Y}_k) + \bar{\rho} \tilde{v} \frac{\partial}{\partial y} (\tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_t + \mu_s}{\sigma_k} \left( \frac{\partial}{\partial y} \tilde{Y}_k \right) \right] + \tilde{\omega}_{v_k} \quad (3.10)$$

$$\bar{\rho} \tilde{u} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x} + \bar{\rho} \tilde{v} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_t + \mu_s}{\sigma_h} \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y} \right) \right] + \tilde{\omega}_h \quad (3.11)$$

Avec,  $\tilde{\omega}_h = \sum_{k=1}^n h_k^o \tilde{\omega}_{v_k}$

Comme il a été déjà dit, les chercheurs Marble et Broadwell ont relié les termes sources  $\tilde{\omega}_v$  de l'espèce k dues à la réaction chimique, à une densité moyenne de surface de flamme  $\tilde{\Sigma}$  définie comme étant une surface par unité de volume.

En définissant une vitesse de disparition de l'espèce k,  $V_{D_k}$  le taux de réaction s'écrit:

$$\tilde{\omega}_{v_k} = - \bar{\rho} V_{D_k} \tilde{\Sigma} \quad (3.12)$$

L'estimation de la vitesse  $V_{D_k}$  est déduite de l'analogie locale de l'écoulement, car elle représente la vitesse de la flamme laminaire dans le modèle local. Par contre le calcul de  $\tilde{\Sigma}$  nécessite l'écriture d'une nouvelle équation de bilan.

En remplaçant (3.12) dans le système d'équations du modèle

global (3.10) et (3.11), nous aurons le système suivant:

$$\bar{\rho} u \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x} + \bar{\rho} v \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_t + \mu_L}{\sigma_k} \left( \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial y} \right) \right] - \bar{\rho} v_{D_k} \tilde{Z} \quad (3.13)$$

$$\bar{\rho} u \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x} + \bar{\rho} v \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_t + \mu_L}{\sigma_h} \left( \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y} \right) \right] - \sum_{k=1}^n \bar{\rho} h_k^0 v_{D_k} \tilde{Z} \quad (3.14)$$

On note qu'il est possible de réduire le nombre d'équations à résoudre en utilisant:

$$\sum_{k=1}^n \tilde{Y}_k = 1 \quad (3.15)$$

Nous considérons dans notre cas, la réaction chimique binaire simple du type:



Où, F, O, P, et s désignent respectivement le fuel, l'oxydant, le produit, et le coefficient stoechiométrique de la réaction.

Cette réaction s'effectue sur une surface infiniment mince, avec une cinétique infiniment rapide.

#### 3.4.2- Equation de bilan pour la surface de flamme

Le rôle de cette équation dans le modèle de la flamme cohérente, est capital puisqu'elle relie le modèle global et le modèle local en tenant compte des différents phénomènes tels que:

- Le transport turbulent,
- La création par étirement,
- L'annihilation mutuelle.

L'équation s'écrit sous la forme :

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Taux de variation} \\ \text{de } \Sigma \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Diffusion turbulente} \\ \text{de } \Sigma \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Production de } \Sigma \\ \text{par étirement} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Disparition de } \Sigma \text{ par} \\ \text{raccourcissement ou annihilation} \end{array} \right]$$

Finalement, en bidimensionnelle, elle s'écrit:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho \tilde{u} \Sigma) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \tilde{v} \Sigma) = \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\mu_t + \mu_l}{\sigma_\Sigma} \left( \frac{\partial \Sigma}{\partial y} \right) \right] + \bar{\rho} \epsilon_s \Sigma - \beta \left[ \frac{V_{Dk}}{\tilde{y}_o} + \frac{V_{Df}}{\tilde{y}_f} \right] \Sigma^2 \quad (3.16)$$

Où,  $\sigma_\Sigma$  est le nombre de Schmidt associé à la surface de flamme;  $\epsilon_s$  est le taux d'étirement moyen lié au gradients de vitesse transversaux par la relation :

$$\epsilon_s = \alpha \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} \right| \quad (3.17)$$

$\alpha$ , et  $\beta$  des constantes liées au modèle.

### 3.4.3- Le modèle local

Ce modèle est une analyse "locale", qui s'intéresse à la structure de la flamme laminaire étirée, et il permet de déterminer les vitesses de disparition des espèces  $k$ , pour les flammes laminares  $V_{Dk}$ . Cela est effectué en tenant compte des propriétés de transports et de la cinétique chimique de la réaction considérée.

Plusieurs auteurs ont calculé, pour une combustion prémélangée, les vitesses de disparition des espèces à travers la surface de flamme, en utilisant une chaîne de réaction plus ou moins développée dite chimie complexe, voir Warnatz /23/, Giovangigli /16/.

Nous utilisons dans cette étude, une autre approche purement analytique déjà présentée par Marble et Broadwell /12/, et qui a fait l'objet de nombreux développements récents, Lucas /26/.

Nous considérons, toujours, la réaction simple du type:



Ceci nous permet d'écrire les équations des espèces  $i$  (  $i=1,2$  ), et de continuité suivants:

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v \frac{\partial Y_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} (D \frac{\partial Y_i}{\partial y}) \quad (3.18)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (3.19)$$

Où,  $D$  est le coefficient de diffusion de l'espèce.

On s'intéresse à la solution stationnaire ( $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ ), et on peut au voisinage de la flamme laminaire de diffusion, appliquer l'hypothèse de la couche limite ( i.e les champs de vitesse et de concentrations massiques ne dépendent pas de  $x$ ,  $\frac{\partial}{\partial x} = 0$  ).

Le système d'équations (3.18) et (3.19), devient alors:

$$v \frac{\partial Y_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} (D \frac{\partial Y_i}{\partial y}) \quad (3.20)$$

et, 
$$\frac{\partial v}{\partial y} = - \epsilon_s \quad (3.21)$$

L'équation (3.21) est donnée pour une flamme laminaire étirée dans son plan à  $y=0$ , avec le taux de déformation  $\epsilon_s$  supposé constant telque:  $\epsilon_s = \partial u / \partial y$

On peut déduire à partir des équations précédentes le système suivant:

$$\begin{cases} (-\epsilon_s Y + c) \frac{\partial Y_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} (D \frac{\partial Y_i}{\partial y}) \\ v = -\epsilon_s Y + c \end{cases} \quad (3.22)$$

Avec, c est une constante donnée par Marble ( $c = W \sqrt{2\epsilon_s D}$ ).

On impose un changement de variable:

$$\xi = \frac{y}{\sqrt{D/2\epsilon_s}} \quad (3.23)$$

Alors, la dérivé par rapport à y est:  $\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \xi}$

d'où, 
$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{1}{\sqrt{D/2\epsilon_s}} \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (3.24)$$

Donc, l'équation (3.22) devient:

$$(-\epsilon_s \sqrt{D/2\epsilon_s} + c) \frac{1}{\sqrt{D/2\epsilon_s}} \frac{\partial Y_i}{\partial \xi} = 2\epsilon_s \frac{\partial^2 Y_i}{\partial \xi^2} \quad (3.25)$$

Remplaçons par la valeur de  $c = W \sqrt{2\epsilon_s D}$ , on aura immédiatement;

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} (Y_i) + \left( \frac{\xi}{2} - W \right) \frac{\partial Y_i}{\partial \xi} = 0 \quad (3.26)$$

Avec, les conditions aux limites suivants:

$$\begin{array}{lll} \text{en } y = +\infty & Y_F = Y_F(+\infty) & ; \quad Y_0 = 0 \\ \text{en } y = -\infty & Y_F = 0 & ; \quad Y_0 = Y_0(-\infty) \end{array}$$

La résolution de l'équation (3.26) donne:

$$\begin{cases} Y_F = Y_F(+\infty) \frac{\operatorname{erf}(-\frac{\xi}{2} - W) - \operatorname{erf}(W)}{1 + \operatorname{erf}(W)} \\ Y_O = Y_O(-\infty) \frac{\operatorname{erf}(-\frac{\xi}{2} - W) - \operatorname{erf}(W)}{1 - \operatorname{erf}(W)} \end{cases} \quad (3.27)$$

On désigne par erf une fonction d'erreur définie comme suivant:

$$\operatorname{erf}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\eta} e^{-u^2} du$$

En  $y=0$ , le rapport des flux massiques de combustible et d'oxydant, est par définition égal au rapport stoechiométrique  $s$  de la réaction chimique utilisée, soit:

$$- \frac{\left( \frac{\partial Y_F}{\partial y} \right)_{y=0}}{\left( \frac{\partial Y_O}{\partial y} \right)_{y=0}} = \frac{1}{s}$$

d'où, 
$$\frac{Y_F(+\infty)(1 - \operatorname{erf}(W))}{Y_O(-\infty)(1 + \operatorname{erf}(W))} = \frac{1}{s} \quad (3.28)$$

Définissant le rapport d'équivalence  $\phi$  comme:

$$\phi = \frac{s Y_F(+\infty)}{Y_O(-\infty)}$$

Alors,  $W$  s'écrit; 
$$W = \operatorname{erf}^{-1} \left( \frac{\phi - 1}{\phi + 1} \right)$$

d'où; 
$$v(y) = -\varepsilon_{\frac{y}{\delta}} + \sqrt{2\varepsilon_{\frac{y}{\delta}} D} \operatorname{erf}^{-1} \left( \frac{\phi - 1}{\phi + 1} \right)$$

À partir de cette relation de la vitesse laminaire, on peut facilement déduire les vitesses de disparition  $v_{D_F}$ ,  $v_{D_O}$ , et qui

correspondent aux flux massiques des deux espèces tels que :

$$V_{D_F} = Y_F(+\infty) \sqrt{\frac{D \epsilon_F}{2 \pi}} \left( \frac{\rho + 1}{\rho} \right) e^{-v^2}$$

$$V_{D_O} = Y_F(-\infty) \sqrt{\frac{D \epsilon_F}{2 \pi}} (\rho + 1) e^{-v^2}$$

Ainsi et compte tenu de ce qui a été considéré dans les cas liés à la diffusion moléculaire  $D$ , la détermination de ces vitesses permet de résoudre le problème local.

Le modèle que nous venons de présenter n'est qu'une étape vers une modélisation des flammes de diffusion utilisant l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide, (i.e qui conviendrait dans le cas où le nombre de Damköler est élevé  $Da = \tau_c/\tau_t$ , où  $\tau_c$  est le temps chimique de réaction, et  $\tau_t$  est le temps caractéristique de la turbulence, figure 3-5.

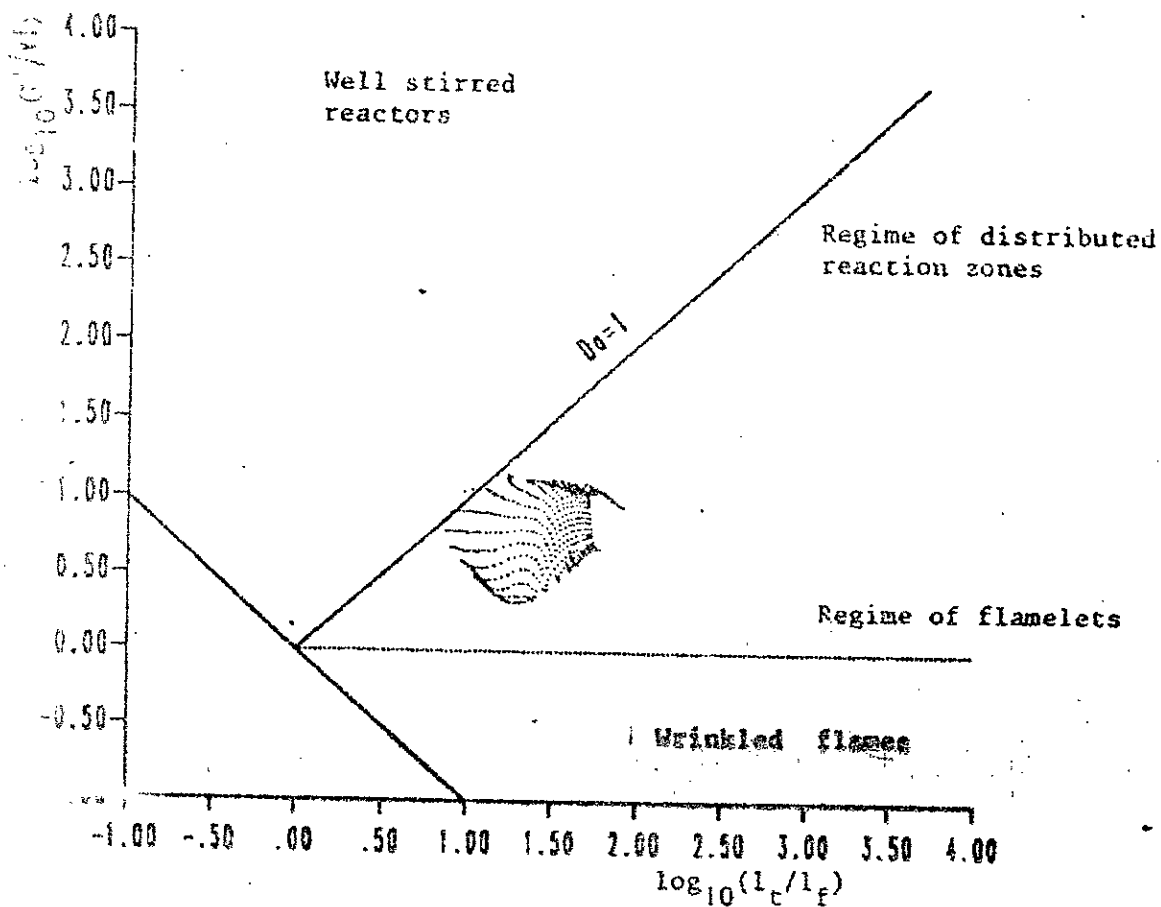
Dans le contraire, où  $Da$  ne peut être considéré comme grand, il est utile d'effectuer le calcul des équations de bilan pour toutes les espèces chimiques provoquées par la chaîne de réactions (chimie complexe), en faisant intervenir la cinétique chimique et les données thermodynamiques de chaque espèce, qui doivent être bien connues, figure 3-6.

### 3.3- Adimensionnement des équations

Nous allons ici, pour des raisons très commodes de simplicité, adimensionner les équations de bilan vues précédemment. Ceci en faisant intervenir des variables réduites basées sur des grandeurs caractéristiques liées à l'écoulement libre le plus rapide ( $y=+\infty$ ) avant l'entrée dans la zone de mélange.

Soient,  $u_1$ ,  $\rho_1$ ,  $T_1$  et  $L$  respectivement la vitesse de l'écoulement rapide, sa masse volumique, sa température et une longueur de





- $v'$  La fluctuation de la vitesse locale,
- $v_f$  Vitesse caractéristique de la flamme laminaire,
- $l_t$  Longueur caractéristique intégrale de la turbulence,
- $l_f$  Epaisseur de la flamme.

Figure 3-5: Classification des différents types de flammes turbulentes en combustion prémélangée, d'après l'adaptation de BORGHI et PETERS.

Methane-air reaction mechanism rate coefficients in the form  $k_i = AT^{\beta} \exp(-E_0/RT)$ . Units are moles, cubic centimeters, seconds, Kelvins and calories/mole.

| Reaction  | A        | $\beta$ | E     |
|---|----------|---------|-------|
| 1. $\text{CH}_3 + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H} + \text{M}$                  | 1.00E+17 | 0.000   | 86000 |
| 2. $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{HO}_2$                        | 7.90E+13 | 0.000   | 56000 |
| 3. $\text{CH}_3 + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2$                           | 2.20E+04 | 3.000   | 8750  |
| 4. $\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{OH}$                            | 1.60E+06 | 2.360   | 7400  |
| 5. $\text{CH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$                  | 1.60E+06 | 2.100   | 2460  |
| 6. $\text{CH}_3\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$           | 7.53E+12 | 0.000   | 167   |
| 7. $\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H}_2$                    | 3.31E+14 | 0.000   | 10500 |
| 8. $\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{H} + \text{M}$           | 3.31E+16 | 0.000   | 81000 |
| 9. $\text{CH}_3\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{HCO} + \text{OH}$                     | 1.81E+13 | 0.000   | 3082  |
| 10. $\text{HCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$                    | 5.00E+12 | 0.000   | 0     |
| 11. $\text{HCO} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO} + \text{M}$                    | 1.60E+14 | 0.000   | 14700 |
| 12. $\text{HCO} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CO} + \text{H}_2$                             | 4.00E+13 | 0.000   | 0     |
| 13. $\text{HCO} + \text{O} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CO}$                              | 1.00E+13 | 0.000   | 0     |
| 14. $\text{HCO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{CO}$                          | 3.00E+12 | 0.000   | 0     |
| 15. $\text{CO} + \text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{M}$                   | 3.20E+13 | 0.000   | -4200 |
| 16. $\text{CO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{H}$                             | 1.51E+07 | 1.300   | -758  |
| 17. $\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{O}$                            | 1.60E+13 | 0.000   | 41000 |
| 18. $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{O}$                  | 7.00E+12 | 0.000   | 25652 |
| 19. $\text{CH}_3\text{O} + \text{M} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{H} + \text{M}$ | 2.40E+13 | 0.000   | 28812 |
| 20. $\text{CH}_3\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2$          | 2.00E+13 | 0.000   | 0     |
| 21. $\text{CH}_3\text{O} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2\text{O}$ | 1.00E+13 | 0.000   | 0     |
| 22. $\text{CH}_3\text{O} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$           | 1.00E+13 | 0.000   | 0     |
| 23. $\text{CH}_3\text{O} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{HO}_2$       | 6.30E+10 | 0.000   | 2600  |
| 24. $\text{CH}_3 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{OH}$                 | 5.20E+13 | 0.000   | 34574 |
| 25. $\text{CH}_3 + \text{O} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{H}$                    | 6.80E+13 | 0.000   | 0     |
| 26. $\text{CH}_3 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{O} + \text{H}_2$                 | 7.50E+12 | 0.000   | 0     |
| 27. $\text{HO}_2 + \text{CO} \rightleftharpoons \text{CO}_2 + \text{OH}$                          | 5.80E+13 | 0.000   | 22934 |
| 28. $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$                                       | 1.70E+13 | 0.000   | 47780 |
| 29. $\text{OH} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{H}$                     | 1.17E+09 | 1.300   | 3626  |
| 30. $\text{H} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{O}$                               | 5.13E+16 | -0.816  | 16507 |
| 31. $\text{O} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{H}$                               | 1.80E+10 | 1.000   | 8826  |
| 32. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{M}^*$                | 2.10E+18 | -1.000  | 0     |
| 33. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{O}_2$              | 6.70E+19 | -1.420  | 0     |
| 34. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{N}_2$              | 6.70E+19 | -1.420  | 0     |
| 35. $\text{OH} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$                  | 5.00E+13 | 0.000   | 1000  |
| 36. $\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons 2\text{OH}$  | 2.50E+14 | 0.000   | 1900  |
| 37. $\text{O} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2 + \text{OH}$                            | 4.80E+13 | 0.000   | 1000  |
| 38. $2\text{OH} \rightleftharpoons \text{O} + \text{H}_2\text{O}$                                 | 6.00E+08 | 1.300   | 0     |
| 39. $\text{H}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{H} + \text{H} + \text{M}^*$                   | 2.23E+12 | 0.500   | 92600 |
| 40. $\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{O} + \text{O} + \text{M}$                     | 1.85E+11 | 0.500   | 95560 |
| 41. $\text{H} + \text{OH} + \text{M} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{M}^*$          | 7.50E+23 | -2.600  | 0     |
| 42. $\text{H} + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{O}_2$                           | 2.50E+13 | 0.000   | 700   |
| 43. $\text{HO}_2 + \text{HO}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$              | 2.00E+12 | 0.000   | 0     |
| 44. $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} \rightleftharpoons \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$         | 1.30E+17 | 0.000   | 45500 |
| 45. $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + \text{H}_2$                 | 1.60E+12 | 0.000   | 5800  |
| 46. $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$        | 1.00E+13 | 0.000   | 1800  |

\*Third body efficiencies:  $k_1(\text{H}_2\text{O}) = 21k_1(\text{Ar})$ ,  $k_3(\text{H}_2) = 3.3k_3(\text{Ar})$ ,  $k_5(\text{N}_2) = k_5(\text{O}_2) = 0$ .  
 \*Third body efficiencies:  $k_{11}(\text{H}_2\text{O}) = 6k_{11}(\text{Ar})$ ,  $k_{12}(\text{H}) = 2k_{12}(\text{Ar})$ ,  $k_{13}(\text{H}_2) = 3k_{13}(\text{Ar})$ .  
 \*Third body efficiencies:  $k_{14}(\text{H}_2\text{O}) = 20k_{14}(\text{Ar})$ .

Figure 3-6: Données thermodiffusives de la cinétique chimique pour une chimie complexe (réaction Méthane-air).

référence. Nous prenons les variables réduites telsque:

$$\begin{aligned} \tilde{u}^+ &= \frac{\tilde{u}}{u_1}, \quad \tilde{v}^+ = \frac{\tilde{v}}{u_1}, \quad x^+ = \frac{x}{L}, \quad y^+ = \frac{y}{L}, \quad u^+ = \frac{u}{u_1 L \rho_1}, \quad u_1^+ = \frac{u_1}{u_1 L \rho_1} \\ \tilde{T}^+ &= \frac{\tilde{T}}{T_0}, \quad \tilde{\rho}^+ = \frac{\tilde{\rho}}{\rho_1}, \quad \text{et} \quad \tilde{\Sigma}^+ = \sqrt{\frac{DL}{u_1}} \tilde{\Sigma} \quad (\text{avec } T_1 = T_0) \end{aligned}$$

Les équations adimensionnées de conservations, deviennent en fonction de ces variables:

Continuité:

$$\frac{\partial}{\partial x^+} (\tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+) + \frac{\partial}{\partial y^+} (\tilde{\rho}^+ \tilde{v}^+) = 0 \quad (3.29)$$

Quantité de mouvement:

$$\tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+ \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial x^+} + \tilde{\rho}^+ \tilde{v}^+ \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial y^+} = \frac{\partial}{\partial y^+} \left[ (\mu_1^+ + \mu_2^+) \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial y^+} \right] \quad (3.30)$$

Espèces chimiques:

$$\tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+ \frac{\partial (\tilde{Y}_k)}{\partial x^+} + \tilde{\rho}^+ \tilde{v}^+ \frac{\partial (\tilde{Y}_k)}{\partial y^+} = \frac{\partial}{\partial y^+} \left[ \frac{\mu_1^+ + \mu_2^+}{\sigma_k} \frac{\partial (\tilde{Y}_k)}{\partial y^+} \right] - \tilde{\rho}^+ v_{Dk} \tilde{\Sigma}^+ \quad (3.31)$$

L'énergie:

Vue l'intérêt que nous portons pour les profils de température dans le calcul de la combustion, nous développons ici, l'équation de l'énergie en fonction de la température, alors:

$$\tilde{\rho} u C_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x} + \tilde{\rho} v C_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} C_p \left[ \frac{\mu_1 + \mu_2}{\sigma_h} \left( \frac{\partial \tilde{T}}{\partial y} \right) \right] - \sum_{k=1}^n \tilde{\rho} h_k^0 v_{Dk} \tilde{\Sigma}$$

on pourra l'écrire sous forme adimensionnée telque:

$$\tilde{\rho}^+ \tilde{u}^+ \frac{\partial \tilde{T}^+}{\partial x^+} + \tilde{\rho}^+ \tilde{v}^+ \frac{\partial \tilde{T}^+}{\partial y^+} = \frac{\partial}{\partial y^+} \left[ \frac{\mu_1^+ + \mu_2^+}{\sigma_h} \left( \frac{\partial \tilde{T}^+}{\partial y^+} \right) \right] - \tilde{\rho}^+ \frac{Q}{C_p T_0} v_{Dk} \tilde{\Sigma}^+ \quad (3.32)$$

Où,  $Q$  est l'énergie produite par la réaction telque:

$$Q = h_f^0 + sh_o^0 - (1+s)h_p^0 ,$$

$f, o, p$  désignent le fuel, l'oxydant et le produit.

Les conditions aux limites deviennent:

$$u^+(y^* = +\infty) = 1.$$

$$u^+(y^* = -\infty) = \lambda \quad (\lambda \text{ est le rapport des vitesses; } \lambda = \frac{u_2}{u_1})$$

$$Y_f(y^* = +\infty) = 1.$$

$$Y_o(y^* = -\infty) = 1.$$

bilan de surface de flamme:

$$\begin{aligned} \bar{\rho}^+ \tilde{u}^+ \frac{\partial}{\partial x^+} (\tilde{\Sigma}^+) + \bar{\rho}^+ \tilde{v}^+ \frac{\partial}{\partial y^+} (\tilde{\Sigma}^+) &= \frac{\partial}{\partial y^+} \left[ \frac{\mu_t^+ \mu_l^+}{\sigma_k} \frac{\partial}{\partial y^+} (\tilde{\Sigma}^+) \right] - \alpha \bar{\rho}^- \left| \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial y^+} \right| \tilde{\Sigma}^+ \\ &\quad - \beta g(\varphi) \sqrt{\left| \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial y^+} \right|} \left[ \frac{1}{\varphi \tilde{Y}_f} + \frac{1}{\tilde{Y}_o} \right] \tilde{\Sigma}^{+2} \end{aligned} \quad (3.33)$$

Avec, 
$$g(\varphi) = \frac{\varphi + 1}{\sqrt{2\pi}} e^{-W^2}$$

et, 
$$W = \text{erf}^{-1} \left( \frac{\varphi - 1}{\varphi + 1} \right)$$

$\varphi$  étant le rapport d'équivalence.

Modèle de Saffman:

1- l'équation de la pseudo-vorticité:

$$\bar{\rho}^+ \bar{u}^+ \frac{\partial \tilde{\omega}^{+2}}{\partial x^+} + \bar{\rho}^+ \bar{v}^+ \frac{\partial \tilde{\omega}^{+2}}{\partial y^+} = \frac{\partial}{\partial y^+} \left[ \bar{\rho}^+ \left( \frac{\mu_t^+ + \mu_l^+}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \tilde{\omega}^{+2}}{\partial y^+} \right] + \alpha^+ \bar{\rho}^+ \tilde{\omega}^{+2} \left| \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial y^+} \right| - \beta^+ \bar{\rho}^+ \tilde{\omega}^{+2} \quad (3.34)$$

2- l'équation de transport de l'énergie cinétique:

$$\bar{\rho}^+ \bar{u}^+ \frac{\partial \tilde{K}^+}{\partial x^+} + \bar{\rho}^+ \bar{v}^+ \frac{\partial \tilde{K}^+}{\partial y^+} = \frac{\partial}{\partial y^+} \left[ \bar{\rho}^+ \left( \frac{\mu_t^+ + \mu_l^+}{\sigma_K} \right) \frac{\partial \tilde{K}^+}{\partial y^+} \right] + \alpha^+ \bar{\rho}^+ \tilde{K}^+ \left| \frac{\partial \tilde{u}^+}{\partial y^+} \right| - \bar{\rho}^+ \tilde{K}^+ \tilde{\omega}^{+2} \quad (3.35)$$

La viscosité adimensionnée  $\mu_t^+ = \bar{\rho}^+ A \frac{\tilde{K}^+}{|\tilde{\omega}^+|}$

avec,  $\tilde{\omega}^+ = \frac{\tilde{\omega} L}{u_t}$ , et  $\tilde{K}^+ = \frac{\tilde{K}}{u_t^2}$

**Remarque**

Les expressions des équations adimensionnées gardent les mêmes formes que les équations de bilan définies précédemment.

Nous omettons, dans les expressions prochaines des équations de bilan, le signe (\*) qui désigne la valeur adimensionnée de la variable considérée. Toutes les variables seront données sous forme adimensionnée.

CHAPITRE IV

SIMULATION NUMERIQUE

#### 4.1- Introduction

Il s'agit maintenant, après avoir donné la formulation générale du problème, de résoudre les équations de bilan déjà décrites dans les chapitres précédents.

Il est bien évident qu'un grand nombre de méthodes numériques, développées au cours de ces dernières années, permettent la résolution des équations de bilan en mécanique des fluides (voir **Spalding** /35/, **Keller** /36/).

Nous utiliserons, dans cette étude, une méthode dont l'algorithme est proposé par **Blottner** /15/ à l'introduction aux méthodes de calcul des couches limites. Cette méthode a été bien adaptée au calcul d'écoulements turbulents réactifs, **Sadallah** /14/, **Darabiha** /13/, **Veynante** /4/. Sur cette base, des transformations ont été faites afin de garder une structure similaire à celle de **Veynante** /4/, et faciliter par conséquent le calcul. Les transformations des équations, le choix de maillage, ainsi que la discrétisation, et la linéarisation de ces équations de bilan seront présentées en détail ultérieurement.

#### 4.2- Transformation des équations

La résolution des équations adimensionnés, nécessite des changements de variables adéquats qui rendent ces équations sous une forme plus simple à résoudre. Nous avons retenu en premier lieu un changement de variables, proposé par Marble et utilisé par Veynante, qui nous permet de limiter le manque d'information sur les conditions aux limites de la vitesse transversale en  $y=0$ .

Le second changement de variables que nous utilisons aussi permet de transformer les équations de bilan d'un écoulement compressible à des équations dont les expressions ressemblent à celles d'un écoulement incompressible.

1°- Changement de variable:

Veynante utilise un changement de variables définit de la façon suivante:

$$x' = x \quad (4.1)$$

$$y' = y + g(x) \quad (4.2)$$

Où  $g(x)$  est une fonction de l'abscisse  $x$  qui sera définie plus loin.

Les dérivées partielles d'une fonction quelconque  $\phi$  en fonction de ces nouvelles variables  $(x', y')$  s'écrivent:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial x'} + \frac{\partial \phi}{\partial y'} \frac{dg}{dx'} \\ \frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial y'} \end{array} \right. \quad (4.3)$$

Les équations de continuité et de la quantité de mouvement deviennent alors:

$$\frac{\partial}{\partial x'} (\bar{\rho} \tilde{u}) + \frac{\partial}{\partial y'} (\bar{\rho} (\tilde{v} + \tilde{u} \frac{dg}{dx}) ) = 0 \quad (4.4)$$

$$\bar{\rho} \tilde{u} \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x'} + (\bar{\rho} (\tilde{v} + \tilde{u} \frac{dg}{dx}) ) \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y'} = \frac{\partial}{\partial y'} (\mu \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y'}) \quad (4.5)$$

Introduisons des composantes de vitesses modifiées:

$$\left\{ \begin{array}{l} u' = \tilde{u} \\ v' = \tilde{v} + \tilde{u} \frac{dg}{dx} \end{array} \right. \quad (4.6)$$



Les équations (4.4) et (4.5), alors peuvent s'écrire:

$$\frac{\partial}{\partial x'} (\bar{\rho} u') + \frac{\partial}{\partial y'} (\bar{\rho} v') = 0 \quad (4.7)$$

$$\bar{\rho} u' \frac{\partial u'}{\partial x'} + (\bar{\rho} v') \frac{\partial u'}{\partial y'} = \frac{\partial}{\partial y'} (u' \frac{\partial u'}{\partial y'}) \quad (4.8)$$

Ce dernier système (équations de continuité et de quantité de mouvement) est identique aux équations de bilan de masse et de quantité de mouvement. De la même manière cette transformation s'applique aux autres équations (Energie, Espèce, Modèle de turbulence, ...etc) sans en modifier l'expression.

Pour pouvoir revenir aux variables d'origine, il faut déterminer la fonction  $g(x)$ . Ceci nous oblige à effectuer un bilan macroscopique de quantité de mouvement: sa projection selon la direction transversale  $y$  s'écrit:

$$\rho_1 u_1 \lim_{y \rightarrow +\infty} \tilde{v}(x, y) + \rho_2 u_2 \lim_{y \rightarrow -\infty} \tilde{v}(x, y) = 0 \quad (4.9)$$

Avec,  $\tilde{v} = v' - \tilde{u} \frac{dg}{dx}$

Ce qui permet d'écrire (4.9) sous la forme:

$$\rho_1 u_1 \left[ v'(x, +\infty) - u_1 \frac{dg}{dx} \right] + \rho_2 u_2 \left[ v'(x, -\infty) - u_2 \frac{dg}{dx} \right] = 0 \quad (4.10)$$

Alors on obtient l'expression:

$$\frac{dg}{dx} = \frac{\rho_1 u_1 v'(x', +\infty) + \rho_2 u_2 v'(x', -\infty)}{\rho_1 u_1^2 + \rho_2 u_2^2} \quad (4.11)$$

Marble impose pour cette transformation que:

$$v'(x', y'=0) = 0$$

$$g(0) = 0$$

Ce qui nous ramène à des conditions aux limites du système transformé, et qui sont:

$$\begin{aligned} u'(x', +\infty) &= u_1 & ; & & u'(x', -\infty) &= u_2 \\ v'(x', y'=0) &= 0 & ; & & \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial v'}{\partial y'} &= 0 \end{aligned}$$

La détermination de la fonction  $g(x)$  se fait à l'aide de l'intégrale:

$$g(x) = \int_0^x \frac{dg}{dx} dx \quad (4.12)$$

2°- Changement de variable:

Il s'agit, ici, d'un deuxième changement de variable qui permet de transformer les équations de bilan sous une forme plus simple dont l'expression ressemble au système d'équations pour un écoulement incompressible (Transformation de Howarth-Dorodnitsyn). Cette transformation permet d'éliminer la variation de la masse volumique dans les équations de bilan, ce qui facilite la résolution du système. Howarth et Dorodnitsyn transforment le couple  $(x', y')$  en  $(\xi, \eta)$  telque:

$$\begin{cases} \xi = x' \\ \eta = \int_0^{y'} \bar{\rho} dy \end{cases} \quad (4.13)$$

Alors, les dérivées partielles d'une fonction quelconque  $\phi$  s'expriment sous la forme:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial x'} = \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \left[ \int_0^{y'} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x'} dy' \right] \\ \frac{\partial \phi}{\partial y'} = \bar{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \end{cases} \quad (4.14)$$

Nous posons:

$$\begin{cases} F = u' \\ V = \bar{\rho} v' + u' \int_0^{y'} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x'} dy' \end{cases} \quad (4.15)$$

En utilisant (4.15) les équations de continuité et de quantité de mouvement, en fonction de ces nouvelles composantes de vitesse, s'écrivent:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0 \quad (4.16)$$

$$F \frac{\partial F}{\partial \xi} + V \frac{\partial F}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (u'_t + u'_l) \frac{\partial F}{\partial \eta} \right] \quad (4.17)$$

Avec,  $u'_t = \bar{\rho} u_t$  et  $u'_l = \bar{\rho} u_l$

Pareillement pour les équations des espèces chimiques et celle de l'énergie:

$$F \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \xi} + V \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{u'_t + u'_l}{\sigma_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \eta} \right] + V_D \tilde{\Sigma} \quad (4.18)$$

$$F \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \xi} + V \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{u'_t + u'_l}{\sigma_h} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial \eta} \right] + \frac{Q}{C_p T_0} V_D \tilde{\Sigma} \quad (4.19)$$

Où Q est l'énergie produite par la réaction.

Equation de bilan de la surface de densité de flamme:

$$F \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \xi} + V \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \frac{u'_t + u'_l}{\sigma_{\Sigma}} \frac{\partial \tilde{\Sigma}}{\partial \eta} \right] + \varepsilon' \tilde{\Sigma} - \beta \left( \frac{V_{D1}}{Y_1} + \frac{V_{D2}}{Y_2} \right) \tilde{\Sigma}^2 \quad (4.20)$$

Avec,  $\varepsilon' = \bar{\rho} \varepsilon$

Equation de l'énergie cinétique turbulente:

$$F \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \xi} + V \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \left( \frac{u'_t + u'_l}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{K}}{\partial \eta} \right) + \alpha' \rho \tilde{K} \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \eta} \right| - \beta' \tilde{K} \tilde{\omega} \quad (4.21)$$

Equation de l'énergie de pseudo-vorticité:

$$F \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial \xi} + V \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \left( \frac{u'_t + u'_l}{\sigma_\omega} \right) \frac{\partial \tilde{\omega}^2}{\partial \eta} \right) + \alpha' \rho \tilde{\omega}^2 \left| \frac{\partial \tilde{u}}{\partial \eta} \right| - \beta' \tilde{\omega}^3 \quad (4.22)$$

Le retour, par l'intermédiaire de ces nouvelles variables, au coordonnées physiques  $x$  et  $y$ , se déduit:

$$\begin{cases} x' = \xi \\ y' = \int_0^\eta \frac{d\eta}{\rho(\xi, \eta)} \end{cases} \quad (4.23)$$

ce qui donne:

$$\begin{cases} x = x' \\ y = y' - g(x) \end{cases} \quad (4.24)$$

#### 4.3- Le maillage

Pour des raisons d'importants gradients de différentes variables ainsi que l'existence des points de singularité au point de l'origine de la zone de mélange, Il a été montré dans plusieurs études que le maillage cartésien en  $(x,y)$  présente des maux adaptations pour une résolution numérique, liés essentiellement à l'évolution de couche limite avec l'abscisse  $x$ .

Pour une bonne adaptation, plusieurs auteurs ont choisi de différents maillage en coordonnées réduites  $(\xi, \eta)$  telque le maillage en forme d'éventail de Levy-Lees (voir **Veynante /4/**).

Dans cette étude, nous nous sommes contentés de garder le maillage semi-cartésien utilisé par Veynante qui permet de transformer le maillage réel en  $(x,y)$  en un autre pseudo-réel en  $(\xi,\eta)$  de la façon présentée dans la figure 4-1.

Le choix de ce maillage est très convenable car la diffusion de l'écoulement dans la zone de mélange garde l'aspect évolutif de la couche limite avec l'abscisse  $x$ . ce maillage nous permet aussi d'alléger la discrétisation ainsi que le calcul numérique.

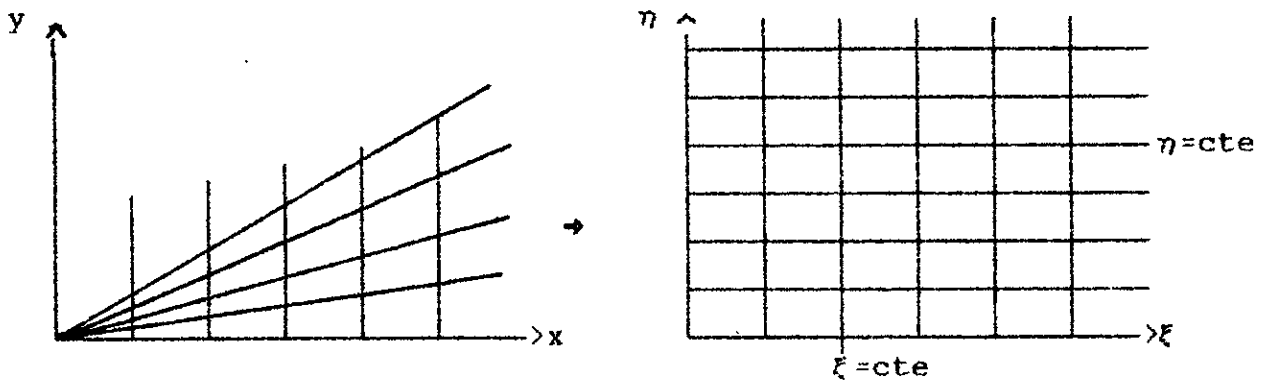
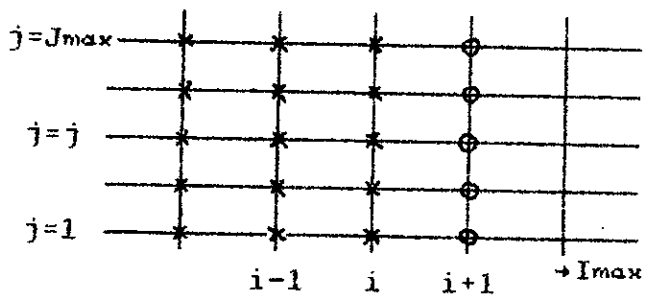


Figure 4-1  
Maillage pseudo-cartésien

#### 4.4- Méthode de résolution

La méthode de résolution est basé sur une discrétisation des équations dynamiques de type implicite, et une linéarisation par la méthode de Newton-Raphson.

Nous considérons que les variables des  $n$  équations de bilan, au noeud  $(i, j)$  du maillage, sont connues au plan  $i$  de calcul et inconnues au plan  $i+1$ .



x noeuds où les variables sont connues.

o noeuds où les variables sont inconnues

Le système discrétisé s'écrit alors sous la forme:

$$\begin{array}{rcl}
 B_1 W_1 - C_1 W_2 & = & D_1 \\
 \hline
 -A_j W_{j-1} + B_j W_j - C_j W_{j+1} & = & D_j \\
 \hline
 -A_{Jmax} W_{Jmax-1} + B_{Jmax} W_{Jmax} & = & D_{Jmax}
 \end{array}
 \quad \downarrow Jmax$$

Où  $A_j, B_j, C_j$  sont des matrices d'ordres  $n$ ,  $D_j$  et  $W_j$  sont des vecteurs de  $n$  éléments:

$W_j$  vecteur inconnu du problème qui s'écrit:

$$W_j = \begin{pmatrix} X_{i+1,j}^1 \\ \hline X_{i+1,j}^k \\ \hline X_{i+1,j}^n \end{pmatrix} \quad \downarrow n \text{ éléments.}$$

Où  $X_{i+1,j}^k$  sont les  $n$  variables ( $F, V, Y_k, T, \dots$ ) aux noeuds  $(i+1, j)$ .

Le système peut s'écrire sous la forme condensé :

$$[A] [W] = [D] \tag{4.25}$$

Où [A] est une matrice bloc tridiagonale d'ordre (n x Jmax) :

$$[A] = \begin{bmatrix} B_1 & -C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -A_2 & B_2 & -C_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A_3 & B_3 & -C_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \backslash & \backslash & \backslash & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \backslash & \backslash & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & \backslash & \backslash & -C_{Jmax-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -A_{Jmax} & B_{Jmax} \end{bmatrix}$$

[W] et [D] sont deux vecteurs du même ordre (n x Jmax) :

$$[W] = \begin{bmatrix} W_1 \\ \vdots \\ W_j \\ \vdots \\ W_{Jmax} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad [D] = \begin{bmatrix} D_1 \\ \vdots \\ D_j \\ \vdots \\ D_{Jmax} \end{bmatrix}$$

La résolution de ce système linéaire, se fait à l'aide de l'algorithme de THOMAS où la matrice [A] est décomposée en un produit de deux matrices [L] et [U], l'une bidiagonale inférieure, l'autre bidiagonale supérieure :

$$[A] = \begin{bmatrix} \alpha_1 & & & & & & \\ -A_2 & \alpha_2 & & & & & \\ & -A_3 & \alpha_3 & & & & \\ 0 & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ 0 & & -A_{Jmax} & \alpha_{Jmax} & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I & -E_1 & & & & & \\ & I & -E_2 & & & & \\ & & I & -E_3 & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ 0 & & & & & -E_{Jmax} & \\ & & & & & & I \end{bmatrix} = [L][U]$$

Cette décomposition entraîne, entre les sous matrices  $[a_j]$  et  $[E_j]$  des relations suivantes:

$$\begin{aligned} [a_1] &= [B_1] \\ [E_1] &= [B_1]^{-1} [C_1] \\ \text{-----} \\ [a_j] &= [B_j] - [A_j][E_{j-1}] & j \in [2, J_{\max}] \\ [E_j] &= [a_j]^{-1} [C_j] & j \in [2, J_{\max}-1] \end{aligned}$$

Aussi, nous posons :

$$[e] = [L][W] = \begin{bmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_j \\ \vdots \\ e_{J_{\max}} \end{bmatrix}$$

Avec  $[e_j]$  des vecteurs d'ordre n.

Alors le système initial (4.25) devient:

$$[L][e] = [D] \tag{4.26}$$

Ce qui implique les équations:

$$\begin{aligned} [e_1] &= [a_1]^{-1} [D_1] \\ [e_j] &= [a_j]^{-1} \left[ [D_j] + [A_j][e_{j-1}] \right] & j \in [2, J_{\max}] \end{aligned}$$

Donc, cette étape nous permet de déterminer  $[e]$ , ce qui permet aussi de déterminer  $[W]$  par l'intermédiaire de :

$$[U][W] = [e]$$

qui entraîne:

$$\begin{aligned} [W_{J_{\max}}] &= [e_{J_{\max}}] \\ [W_j] &= [E_j][W_{j+1}] + [e_j] & j \in [1, J_{\max}-1] \end{aligned}$$

Cette dernière étape, inversée car  $j$  varie de  $J_{\max}$  à 1, nous permet de calculer le vecteur  $[W]$  qui est l'inconnu dans notre étude.



Pour résoudre cet algorithme, nous avons fait recours à des sous programmes de résolution proposés par **Blottner /15/**, et qui sont très bien conçus pour un minimum d'encombrement de mémoire.

#### 4.5- Linéarisation et discrétisation des équations

##### 4.5.1- Linéarisation

La linéarisation des termes non linéaires de la forme :  $V \frac{\partial X}{\partial \eta}$  ou  $X^2$  que l'on trouve dans l'équation de quantité de mouvement ou dans les équations de transport, se fait à l'aide du développement en série de Taylor de fonction à plusieurs variables en écrivant:

$$V \frac{\partial X}{\partial \eta} = \bar{V} \frac{\partial X}{\partial \eta} - \bar{V} \frac{\partial \bar{X}}{\partial \eta} + V \frac{\partial \bar{X}}{\partial \eta}$$

$$X^2 = 2\bar{X}X - \bar{X}^2$$

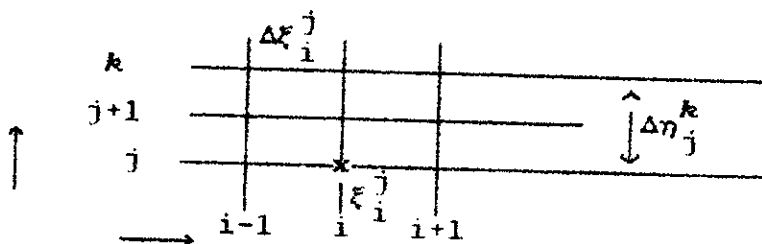
Où X: représente l'une des variables: F, K, ε, T, Yi, ... .

$\bar{X}$ : est la même variable qui supposée connue et déterminée à partir du plan précédent.

##### 4.5.2- Discrétisation

Toutes les équations seront discrétisées au plan  $i+1/2$ , soit en  $j-1/2$  s'il n'existe pas de termes en dérivée seconde (équation de continuité), soit en  $j$  dans le cas contraire.

La discrétisation de toutes les équations de bilans est donnée d'une façon très détaillée en ANNEXE B, et utilisant les notations lies au maillage suivant:



Nous utilisons dans ce qui va suivre uniquement le résultat des équations de bilans discrétisées obtenues en ANNEXE B.

1°/ Premier système d'équations :

Les équations de continuité et de quantité de mouvement ainsi ainsi discrétisées peuvent s'écrire sous la forme:

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_{i+1}^{j-1} \\ V_{i+1/2}^{j-1} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_{i+1}^j \\ V_{i+1/2}^j \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_{i+1}^{j+1} \\ V_{i+1/2}^{j+1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} D_1 \\ D_2 \end{vmatrix}$$

2°/ Deuxième système d'équations (Fermeture  $\omega$ ,  $K$ ):

Chacune des équations discrétisées de transport de la pseudo-vorticité, et celle de transport de l'énergie cinétique turbulente peuvent se mettre à leur tour sous la forme du système:

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Omega_{i+1}^{j-1} \\ K_{i+1/2}^{j-1} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Omega_{i+1}^j \\ K_{i+1/2}^j \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Omega_{i+1}^{j+1} \\ K_{i+1/2}^{j+1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} D_1 \\ D_2 \end{vmatrix}$$

3°/ Troisième système d'équations ( Equations chimiques ) :

Les Cinq équations restantes (conservation des espèces, bilan de surface de flamme, et énergie) peuvent aussi s'écrire sous une forme de système discrétisé:

$$\begin{vmatrix} A_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_{55} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \Sigma \\ T \end{vmatrix}_{i+1}^{j-1} + \begin{vmatrix} B_{11} & 0 & 0 & B_{14} & 0 \\ 0 & B_{22} & 0 & B_{24} & 0 \\ 0 & 0 & B_{33} & B_{34} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{54} & B_{55} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \Sigma \\ T \end{vmatrix}_{i+1}^j + \begin{vmatrix} C_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & C_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ \Sigma \\ T \end{vmatrix}_{i+1}^{j+1} = \begin{vmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ D_4 \\ D_5 \end{vmatrix}$$

Chacun des ces 3 systèmes, ainsi découplés et donnant des systèmes sous forme bloc-tridiagonale, est soluble par l'algorithme de Thomas déjà présenté précédemment.

### 5- Conditions aux limites

La résolution des équations discrétisées précédentes, revient à résoudre les trois (3) sous-systèmes données plus haut, ce qui nécessite d'écrire des conditions aux limites des grandeurs transversales, ainsi que la connaissance des profils des différentes variables au plan initial du calcul.

a) 1<sup>er</sup> sous-système:  $(F, V)$

Le calcul, comme il a été montré, se décompose en deux étapes:

Entre  $\eta=0$  et  $\eta=+\infty$  d'une part, et entre  $\eta=0$  et  $\eta=-\infty$  d'autre part:

Dans l'écoulement externe (i.e. aux points  $\eta=\pm\infty$ ), les conditions aux limites sont:

$$\begin{aligned} F(\eta=+\infty) &= u_1 & \text{et} & & \frac{\partial V}{\partial \eta} &= 0 \\ F(\eta=-\infty) &= u_2 \end{aligned}$$

qui se discrétisent de la façon suivante:

$$F_{i+1}^{jmax} = u_1 \text{ ou } u_2 \text{ selon le demi-calcul considéré.}$$

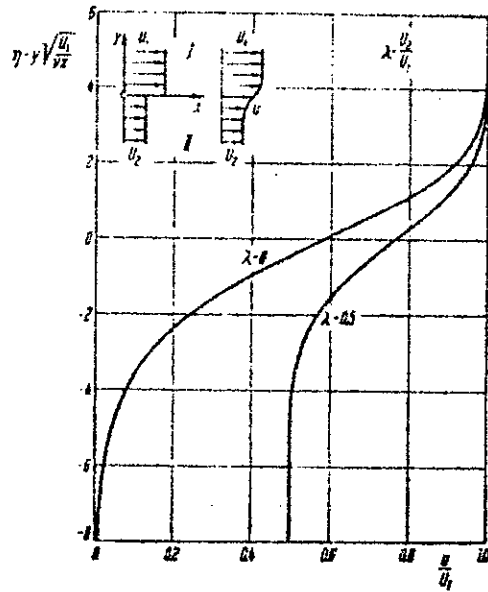
$$V_{i+1}^{jmax} = V_{i+1}^{jmax-1}$$

Par contre, au point  $\eta=0$ , la vitesse transversale  $V=0$ , alors que la vitesse axiale  $F$  doit garder sa continuité entre les 2 demi-calcul telque:

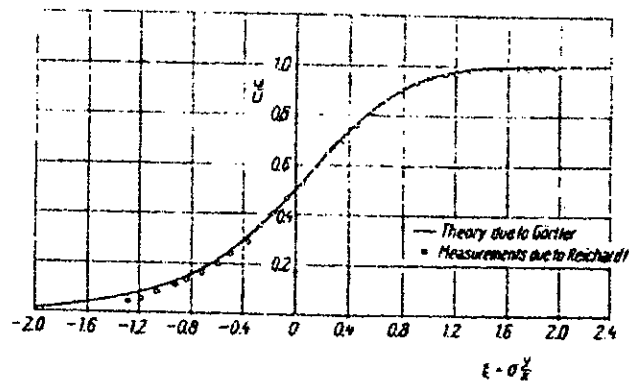
$$F(\eta=0^+) = F(\eta=0^-)$$

Profil initial de  $F$ :

Le profil initial de la vitesse axiale  $F$  est définie par un profil type couche limite de Blasius, figure 4-2. Nous avons gardé un profil initial comme le propose **Veynante** /4/, dans le



(a)



(b)

Figure 4-2. - Profil adimensional de viteze în zona de amestec, după Hook (a).  
 - Profil adimensional de viteze, după Görtler (b).  
 (Tras de Veynante).

cas d'un écoulement à vitesses axiales  $u_1$  et  $u_2$ , fixé par le raccord, en  $\eta=0$ , de deux fonctions type:

$$F(\eta) = a (1 - b \exp(-c(\eta^2)))$$

Où  $a$ ,  $b$ , et  $c$  trois constantes, différentes selon le cas du demi-calcul ( $\eta \geq 0$  ou  $\eta \leq 0$ ) et qui sont déterminées par:

- La continuité de  $F$  en  $\eta=0$ .
- La valeur choisie du minimum de  $F$  (défaut de vitesse de sillage).
- Le respect du rapport du vitesse choisi ( $\lambda = \frac{u_2}{u_1}$ ).
- l'épaisseur de la couche limite initiale.

#### a) Profil initial de $V$ :

Le profil initial de la vitesse transversale  $V$  doit être compatible avec celui défini pour  $F$ , comme le propose Sadallah /14/. Ce profil est déterminé à partir des équations dynamiques et du profil de  $F$ .

En combinant les équations de continuité et de la quantité de mouvement dans le plan initial, on obtient:

$$-F \frac{\partial F}{\partial \eta} + V \frac{\partial F}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (\nu_t' + \nu_t') \frac{\partial F}{\partial \eta} \right]$$

Ce qui permet de donner, après résolution dans le plan initial, le profil de  $V$ .

#### b) 2<sup>ème</sup> sous-système: ( $\Omega$ , $K$ )

Nous allons, ici, donner les conditions initiales pour les variables liées au modèle de Saffman qui permet de déterminer la viscosité turbulente:

$$\nu_t = A \frac{K}{\omega} = A \frac{k}{\sqrt{\Omega}}$$

Nous supposerons que, en dehors de la zone de mélange,

l'écoulement est laminaire, ce qui signifie que la viscosité turbulente  $\mu_t = 0$ , et par le même l'énergie cinétique turbulente  $K$  est telle:

$$\lim_{\eta \rightarrow \pm\infty} K = 0$$

Nous considérons, aussi, que l'écoulement est irrotationnel à l'infini:

$$\lim_{\eta \rightarrow \pm\infty} \omega = 0$$

L'initialisation de l'énergie cinétique turbulente  $K$ , et de la pseudo-vorticité  $\omega$  consiste à utiliser des profils du type "courbes en cloche", en posant: (voir **Veynante /4/**)

$$K(\eta) = a \exp(-b \eta^2)$$

$$\text{et, } \omega(\eta) = a' \exp(-b' \eta^2)$$

Où  $a, a'$  sont liés par:

$$\mu_t = A \frac{a}{a'} \exp(-(b-b')\eta^2)$$

Avec,  $A \frac{a}{a'}$  est une autre constante, et  $b, b'$  des constantes choisies en fonction de l'épaisseur initial de la couche de mélange.

c) 3<sup>ème</sup> sous-système: ( $Y_i, \Sigma, T$ )

Les conditions aux limites à l'infini loin de la réaction chimique sont:

$$Y_1(\eta=+\infty)=1 \quad \text{et} \quad Y_1(\eta=-\infty)=0$$

$$Y_2(\eta=+\infty)=0 \quad \text{et} \quad Y_2(\eta=-\infty)=1$$

$$Y_3(\eta=\pm\infty)=0 \quad \text{et} \quad \Sigma(\eta=\pm\infty)=0$$

Pour la température  $T$  aux points  $\eta=\pm\infty$  est supposée constante et elle est donnée comme une température de référence.

\* Profils initiaux: ( $Y_i$ ,  $\Sigma$ ,  $T$ )

Les profils initiaux des concentrations  $Y_i$ , de la densité de surface de flamme  $\Sigma$ , ainsi que la température  $T$ , qui dans notre cas est choisie à la sortie de la tuyère, peuvent être déduites des résolutions analytiques de Marble (voir **Veynante /4/**), en utilisant la fonction d'erreur exponentielle (erf).

$$Y_1(\eta) = \frac{1}{2} (1 + \text{erf}(-a_1 \eta))$$

$$Y_2(\eta) = \frac{1}{2} (1 + \text{erf}(+a_2 \eta))$$

$$\Sigma(\eta) = a_3 \exp(-b_3 \eta^2)$$

Où  $a_1$ ,  $a_2$ ,  $a_3$  et  $b_3$  sont des constantes.

d) Conditions aux limites et profil initial de  $\rho$ :

Les conditions aux limites aux points  $\eta = \pm\infty$  pour la masse volumique sont supposée connues avant la sortie de la tuyère, on les injecte comme données du problème telque:

$$\begin{aligned} &\text{à } \eta = +\infty && \rho(\eta) = \rho_1 \\ \text{et, à } &\eta = -\infty && \rho(\eta) = \rho_2 \end{aligned}$$

Le profil initial de la masse volumique  $\rho$  peut être déduit à partir d'un profil type de celui utilisé pour la vitesse axiale ou de la température.

CHAPITRE V

ORGANISATION DU CALCUL ET RESULTATS NUMERIQUES



## CHAPITRE V

### ORGANISATION DU CALCUL ET RESULTATS NUMERIQUES

#### 5.1- Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation des résultats numériques. Il est divisé en deux parties: Dans la première, nous présenterons l'organisation et la description du code de calcul. Dans la deuxième partie, nous présenterons quelques résultats numériques concernant un écoulement dont la structure de la flamme est l'oxydation de propane, nous nous contenterons, parmi les résultats qui peuvent être donnés par le calcul, uniquement des variables qui sont les plus intéressantes et les plus explicites, à savoir, les profils de vitesse, de température, de masse volumique, de densité de surface de flamme et les fractions massiques des réactants et des produits.

#### 5.2- Organisation du calcul

Comme il a été dit précédemment, le code de calcul tel qu'il est établi, permet de résoudre l'ensemble des équations simultanément en trois sous-systèmes découplés entre eux.

Le premier sous-système regroupe l'équation de continuité et celle de quantité de mouvement. Le second relie les équations relatives au modèle de turbulence. Le troisième regroupe les équations dues à la réaction chimique (i.e fractions massiques, densités de surface de flamme, et températures).

Ce découplage permet aussi de minimiser l'encombrement mémoire du calculateur, car chaque sous-système emploie des matrices de rang moins élevé que la résolution simultanée de toutes les équations.

A partir de cette structure, et étant donné que la vitesse transversale  $V$  qui n'est connue que sur la droite  $\eta=0$ , la résolution du premier sous système (qui donne les champs de vitesses  $F$  et  $V$ ) nécessite l'utilisation de cette droite, pour l'une des limites transversales, ce qui nous permet de décomposer le calcul en deux étapes: la première entre  $\eta=0$  et  $\eta=+\infty$ , la seconde entre  $\eta=0$  et  $\eta=-\infty$ .

Les conditions aux limites seront complétées par l'écriture de la continuité de  $F$  en  $\eta=0$ .

La résolution des deux autres sous-systèmes peut être faite en une seule fois, directement entre  $\eta=0$  et  $\eta=+\infty$ .

### 5.3- Description du code de calcul

Le programme de calcul se compose de trois parties principales:

- La première partie est un ensemble de sous programmes permettant de donner le maillage, d'initialiser les paramètres nécessaires au calcul, et de les stockés comme des profils initiaux.
- La second, est la partie qui permet de résoudre les trois sous-systèmes d'équations de bilan moyennant les conditions aux limites.
- La troisième partie est composée par des sous programmes de retour aux paramètres réels, de les stockés sur fichiers, et de les réinitialiser pour le pas de calcul suivant.

La figure 5-1 donne l'organigramme simplifié du code de calcul.

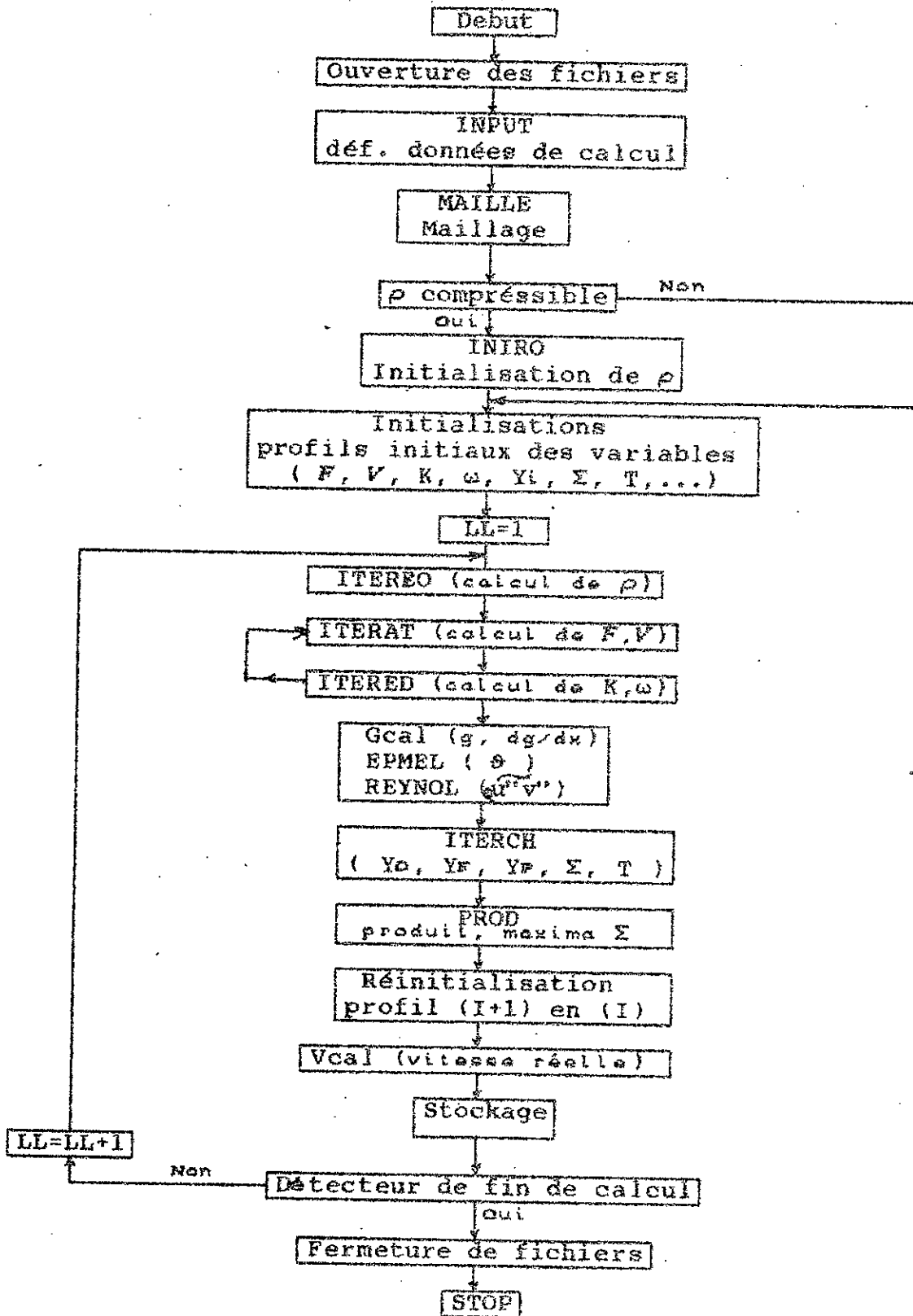


Figure 5-1  
Organigramme de calcul

#### 5.4- Résultats numériques

Les résultats présentés, ici, sont liés à une structure d'une flamme d'oxydation du propane dont les paramètres principaux utilisés dans le calcul sont rassemblés au figure 5-2. Nous signalons aussi, que les résultats sont données en coordonnées physiques, et que toutes les variables calculées sont présentées en grandeurs adimensionnées.

##### 5.4.1- Champ de vitesse

Les figures 5-3-a et 5-3-b présentent le champ de vitesse tel qu'il a été calculé. La figure 5-3-a donne l'évolution des profils de vitesse axiale  $\tilde{u}$  en fonction des abscisses  $x$ , ce qui montre qu'avec un rapport de vitesse  $\lambda=0.2$ , le développement des premiers profils de  $\tilde{u}$  ne présentent pas la zone de sillage qui généralement est due aux effets de gradients de vitesse transversaux au niveau de la plaque plane de séparation de écoulement. L'élargissement de ces profils montre que la couche de mélange commence à se développer en aval, on remarque aussi que à l'ordonnée  $y=0$ , la vitesse axiale  $\tilde{u}$  reste constante ( $\partial\tilde{u}/\partial x=0$ ) car ce point correspond effectivement à un extrémum des profils de vitesse transversale  $\partial\tilde{v}/\partial y=0$  (résultats observés aussi par Veynante /4/).

La figure 5-3-b donne les profils successifs de la vitesse transversale  $\tilde{v}$ . Cette vitesse varie rapidement dans la zone de mélange passant d'une valeur nulle à une valeur positive. On remarque qu'au début de la zone de mélange la vitesse transversale atteint une valeur maximale due au phénomène de rencontre des deux écoulement à la sortie de la plaque plane où le mélange provoque un développement d'une vitesse maximale qui décroît rapidement et atteint même des valeurs négatives ( $\tilde{v}<0$ ) ce qui correspond à la la zone d'aspiration de l'air ambiant.

En allant plus en aval de l'écoulement la vitesse transversale tend à se stabiliser dans un intervalle de grandeur de  $[0, 6 \cdot 10^{-2}]$  ce qui reste très faible par rapport à la vitesse axiale.

#### 5.4.2- Champs de concentrations

Le champ des fractions massiques du carburant est présenté dans la figure 5-4-a qui montre l'évolution des profils de concentration  $Y_f$  correspondant à la proportion de propane dans la zone de mélange. Les profils des fractions massiques de l'oxydant (l'air) sont présentés à la figure 5-4-b.

La figure 5-4-c donne les différents profils des fractions massiques obtenues après réaction et qui correspondent aux produits de la réaction  $A + B \longrightarrow P$ .

Vu qu'on a pris l'hypothèse d'une réaction chimique extrêmement rapide, les produits chimiques résultants de la réaction sont pris comme un seul élément, qui a les caractéristiques d'un mélange des produits réels obtenus de cette réaction.

Ces résultats ne sont pas loins des ceux trouvés par quelques auteurs entre autre ceux de Veynante /4/ figures 5-5 a,b,c), cette approche est prise de son coté qualitative et non pas du coté quantitative car l'effet de la masse volumique est certainement non négligeable comme nous le verrons plus loin.

#### 5.4.3- Champ de la densité de surface de flamme

La figure 5-6 montre les profils successifs de la densité de surface de flamme, l'évolution de cette dernière dans la zone de mélange croit au debut rapidement jusqu'à atteindre un maximum pour  $x = 2.5$ , ce qui traduit le développement de la réaction, puis décroît, car le taux de réaction reste supérieur au taux de mélange des deux réactions. Nous remarquons aussi que la zone de réaction reste limité ( $-0.2 \leq y \leq 0.2$  pour  $x = 2.5$ ) et elle est plus penchée du coté de réactant oxydant.

#### 5.4.4- Champ de température et de masse volumique

Le champ des températures est donné par la figure 5-7, on remarque que la température augmente dans la zone de réaction jusqu'à une température maximale correspondant à  $x = 3.5$ , puis elle

commence à diminuer car le taux de mélange devient de plus en plus rare ce qui rend la réaction moins dense, donc la température plus faible.

Ce profil maximal de la température est comparable quantitativement avec celui de la figure 5.8, obtenu par Leca/26/ utilisant une autre méthode appelée scalaire passif, pour une flamme de diffusion.

La figure 5-9, présente l'évolution des profils de la masse volumique dans la zone de mélange. On remarque que les profils décroissent selon l'abscisse  $x$  ce qui est correcte, car la température diminue également (diffusion) et  $\rho \sim 1/T$ , ce qui ne semble pas le cas à partir d'un certain profil limite, où généralement la température commence à diminuer ("bosse" sur les profils de masse volumique).

Cette "bosse" se situe aux environs du maximum des produits de réaction, où  $\rho$  augmente relativement avec une diminution de la température, par contre l'extension de la diffusion, sur la largeur de la zone de mélange, reste remarquable.

#### 5.4.5- Comparaison

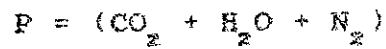
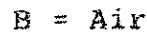
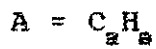
La figure 5-10 montre l'effet de la masse volumique sur les différents paramètres dans un écoulement le long de la zone de mélange. Cette figure présente les profils de concentrations pour un écoulement incompressible ( $\rho = \text{Cte}$ ) et pour un écoulement compressible ( $\rho$  variable), ce qui explique relativement le décalage des résultats numériques et les résultats expérimentaux dans l'approche numérique des études d'écoulements réactifs utilisés par plusieurs auteurs.

La figure 5-11 montre l'effet du rapport d'équivalence (richesse réduite) sur les différents profils :-

- (a)- des produits de réaction pour le pas  $x = 2$  ;
- (b)- de la densité de surface de flamme ;
- (c)- de température ( $x = 2$ ) ;
- (d)- de la masse volumique ( $x = 2$ ).

Ces profils sont tracés pour trois valeurs différentes de  $\varphi$ . On remarque que les trois premiers paramètres augmentent avec  $\varphi$  par contre le dernier, celui de la masse volumique diminue sensiblement. ce qui est logique car le mélange devient plus riche. La réaction devient plus complète ce qui augmente à la fois le taux de réaction, la température et diminue la masse volumique qui est inversement proportionnelle à la température  $T$ .

- Réaction chimique :



- Rapport des vitesses  $\lambda = u_2/u_1 = 0.2$  ;
- L'enthalpie de la réaction  $\Delta H = 4.65 \cdot 10^7$  Joule/mole ;
- Coefficient Stoechiométrique Massique de la réaction  $s = 15.63$
- Concentration du fuel  $Y_F = 0.065$  ;
- Température initiale des gaz frais  $T_0 = 298$  K ;
- Constante des gaz parfaits  $R = 8.314$  J/mol.K ;

Figure 5-2: tableau donnant les Paramètres utilisés dans la simulation numérique.



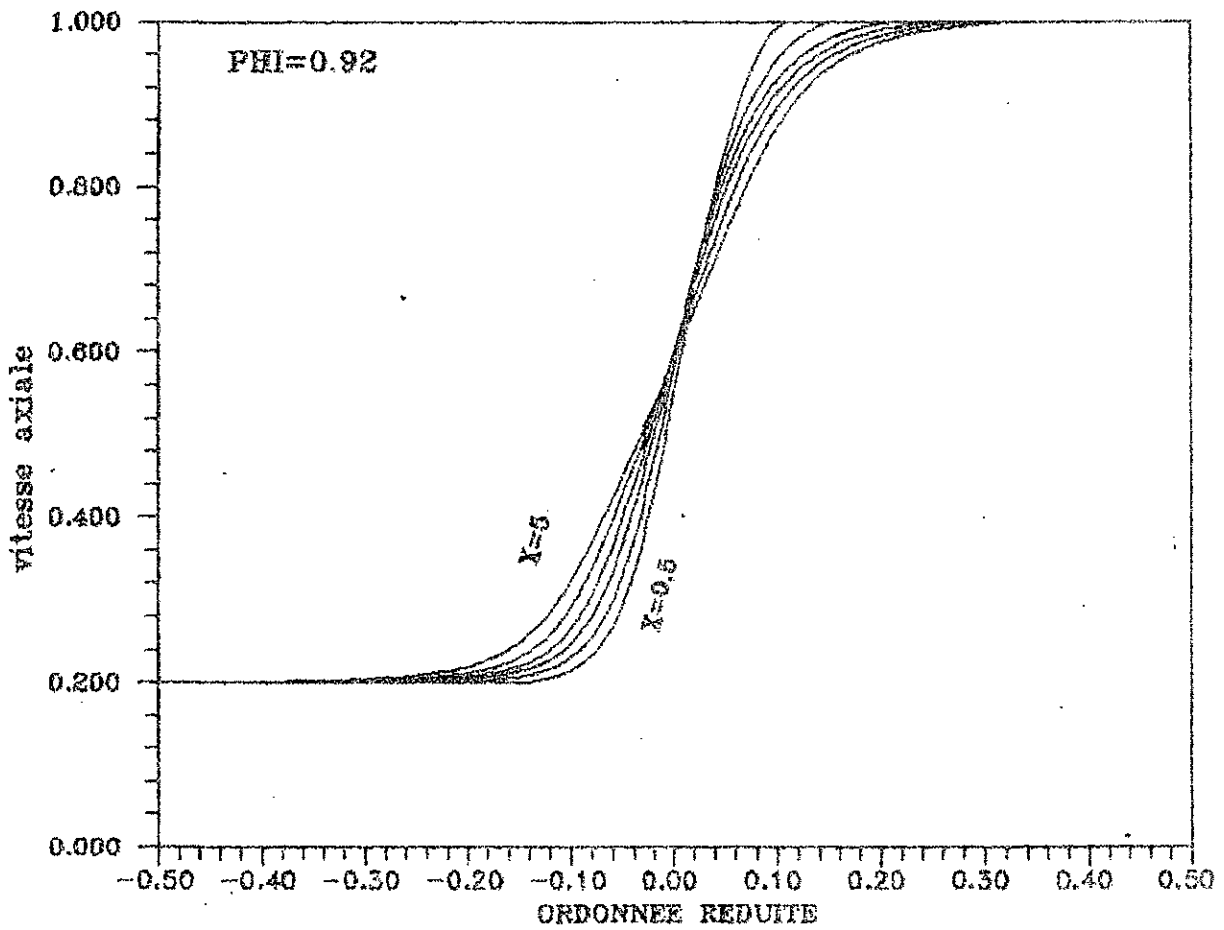


Figure 5-3-a: Evolution du profil de la vitesse axiale moyenne en fonction de l'abscisse  $x$ .

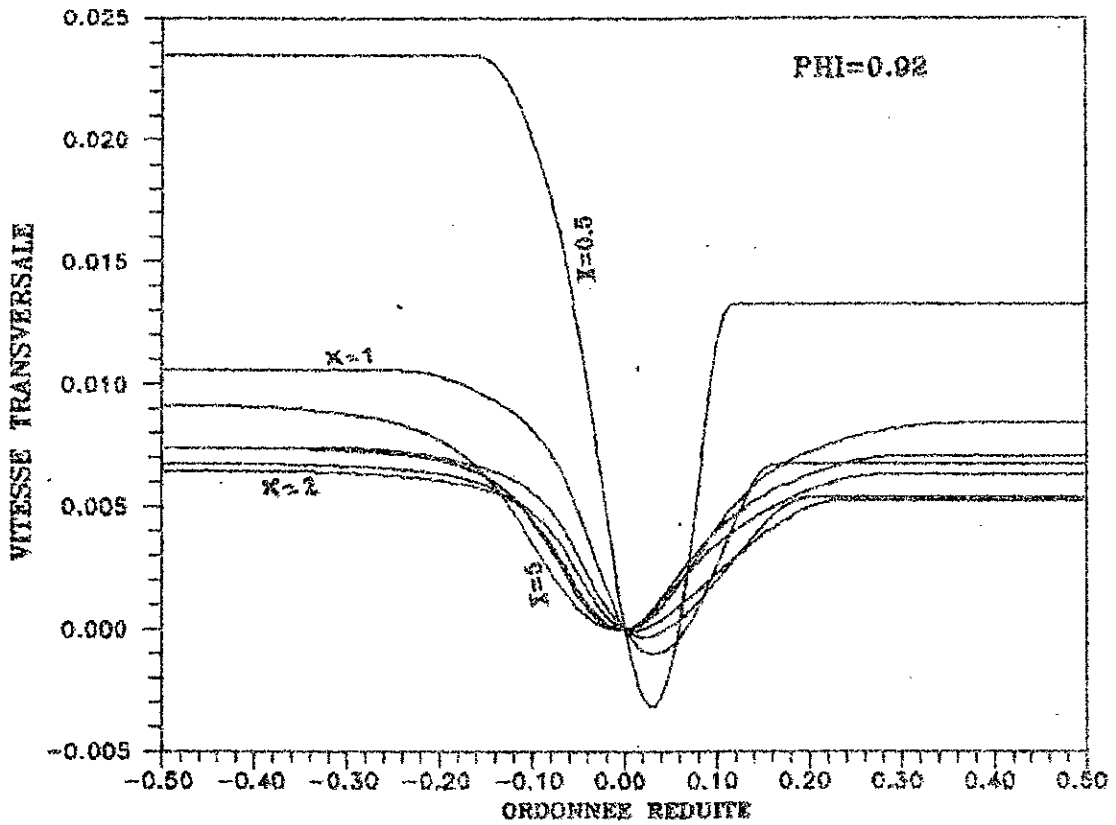


Figure 5-3-b: Evolution du profil de la vitesse transversale moyenne en fonction de l'abscisse  $x$ .

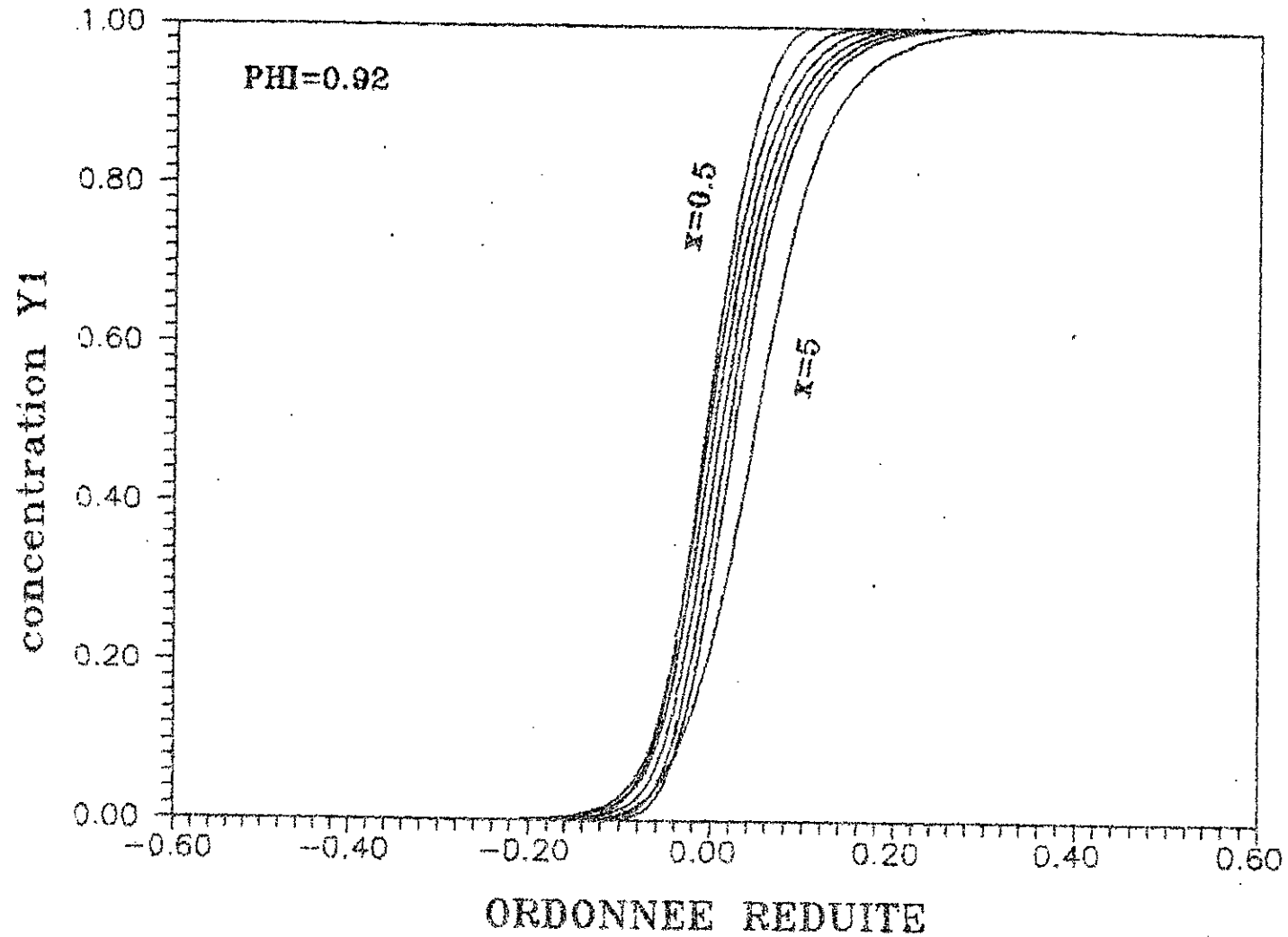


Figure 5-4-a: Evolution du profil de concentration de l'espèce 1 en fonction de l'abscisse  $x$ .

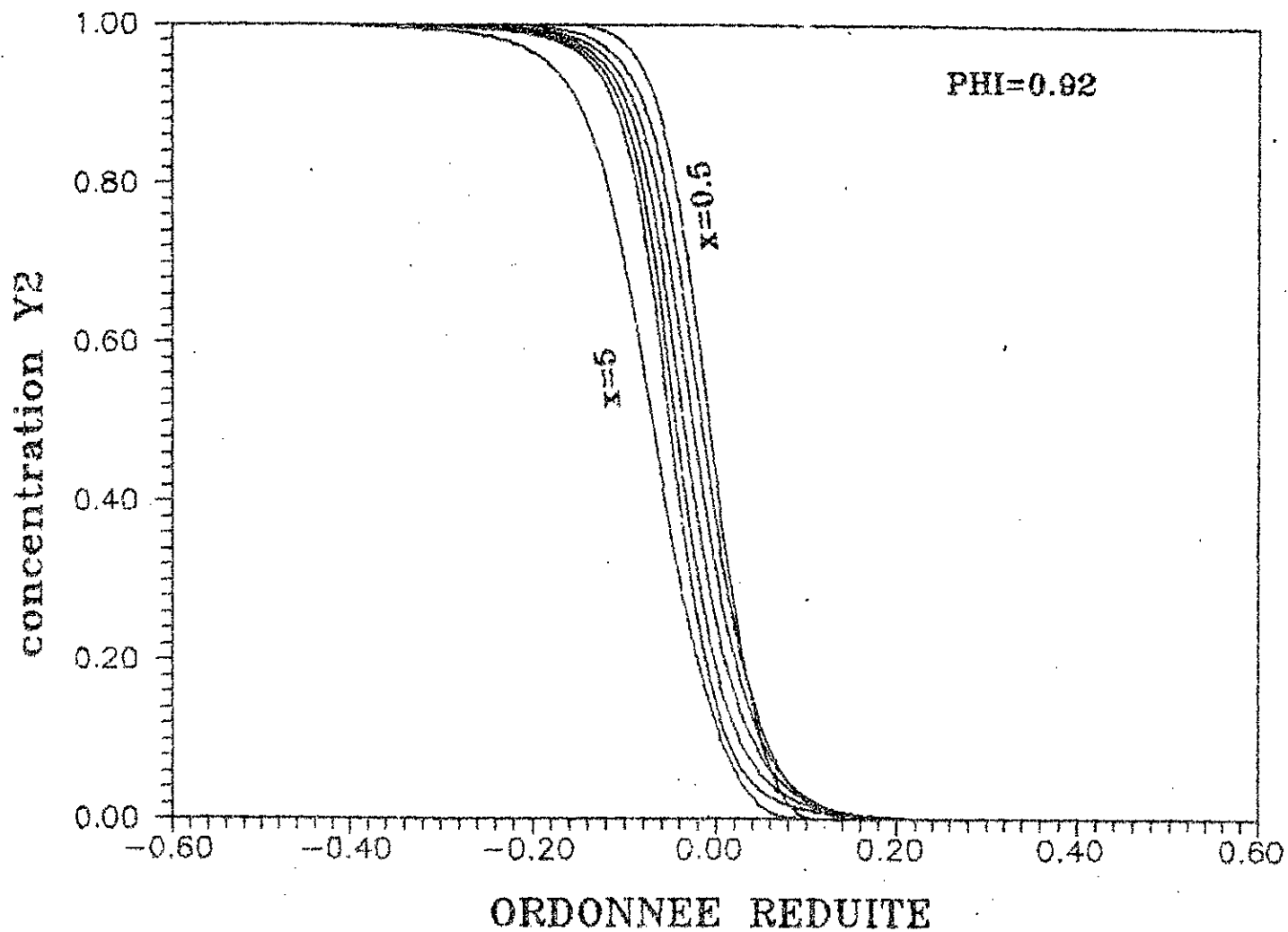


Figure 5-4-b: Evolution du profil de concentration de l'espèce 2 en fonction de l'abscisse x.

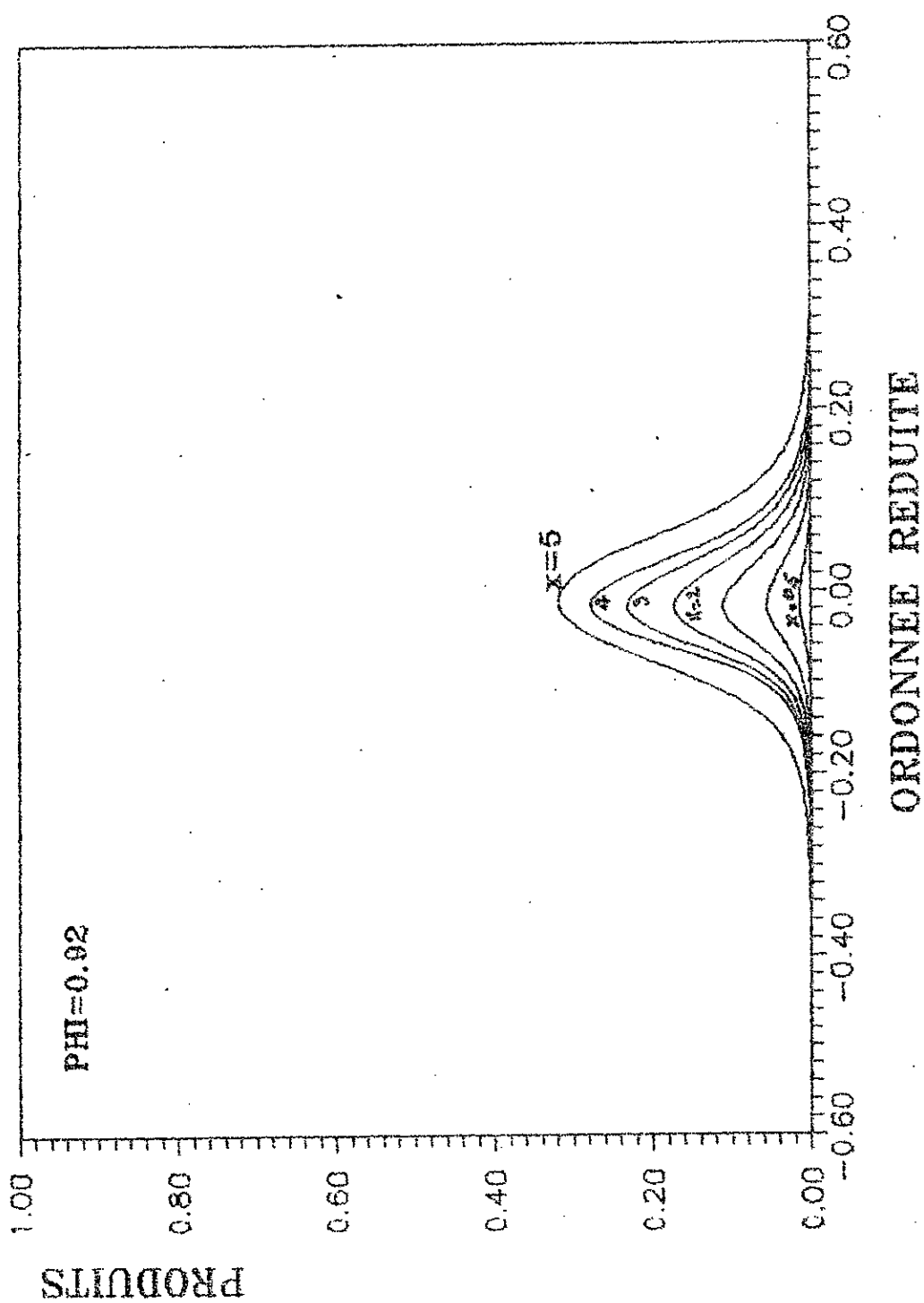


Figure 5-4-c: Evolution du profil de concentration des produits en fonction de l'abscisse  $x$ .

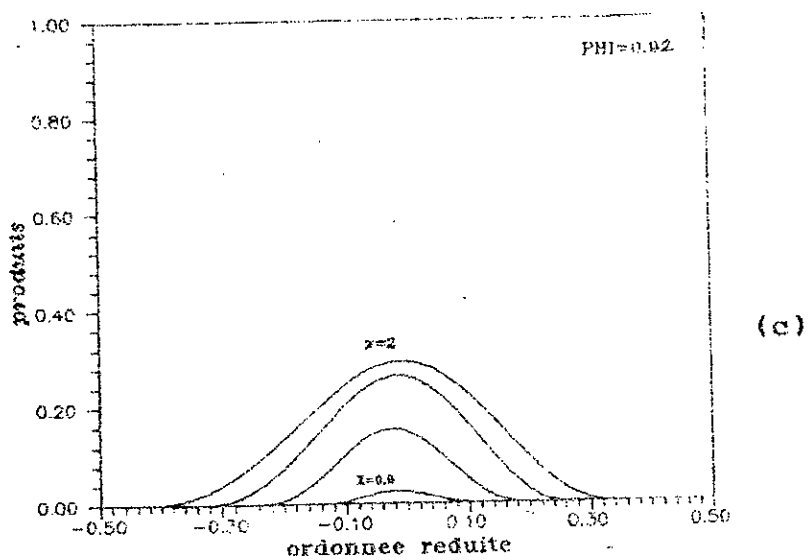
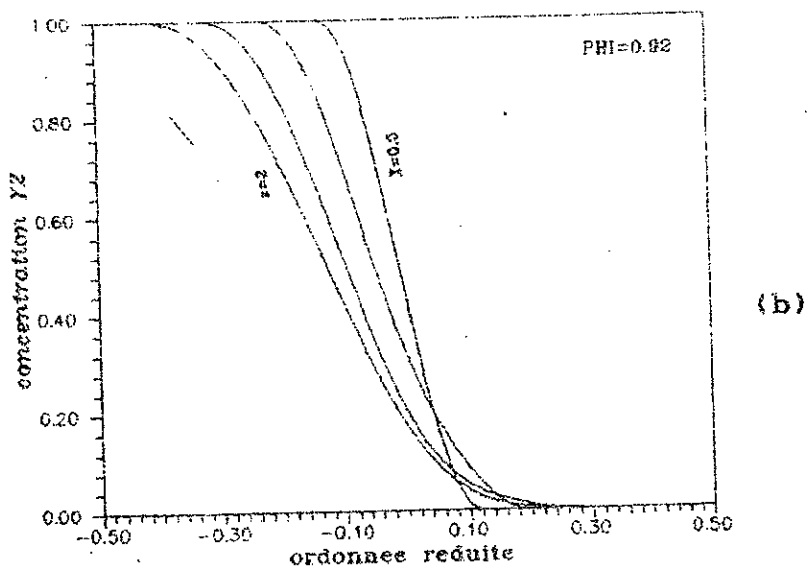
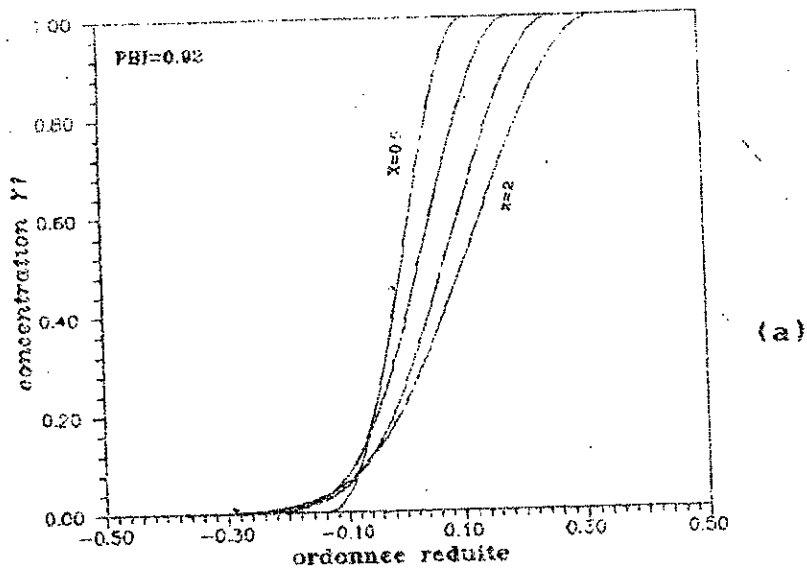


Figure 5-5: Profils successifs de concentration du carburant (a), concentration de l'oxydant (b), concentration des produits (c), obtenus par VEYNANTE /4/.

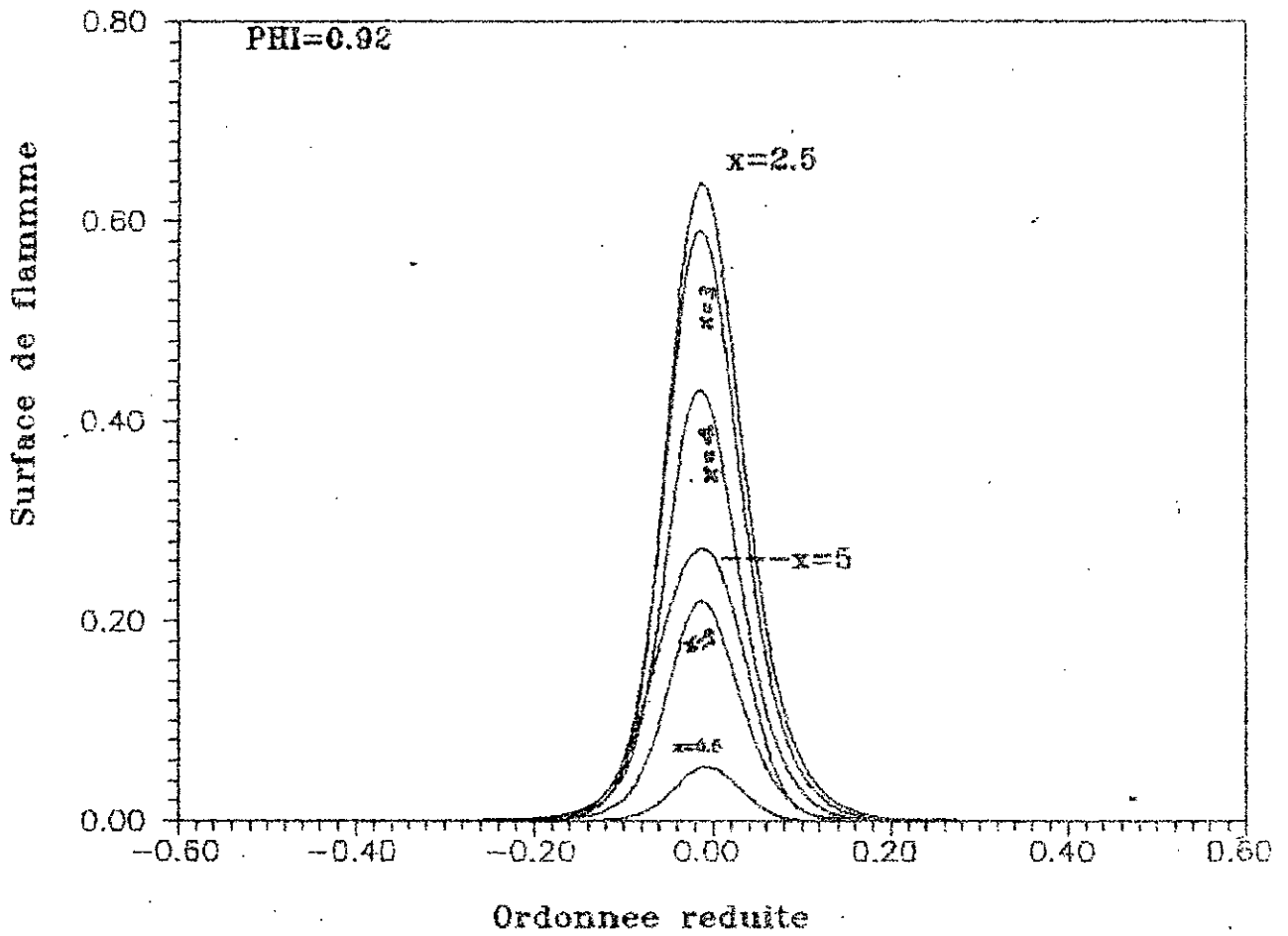


Figure 5-6: Evolution du profil de densité de surface de flamme dans la zone de mélange en fonction de l'abscisse  $x$ .

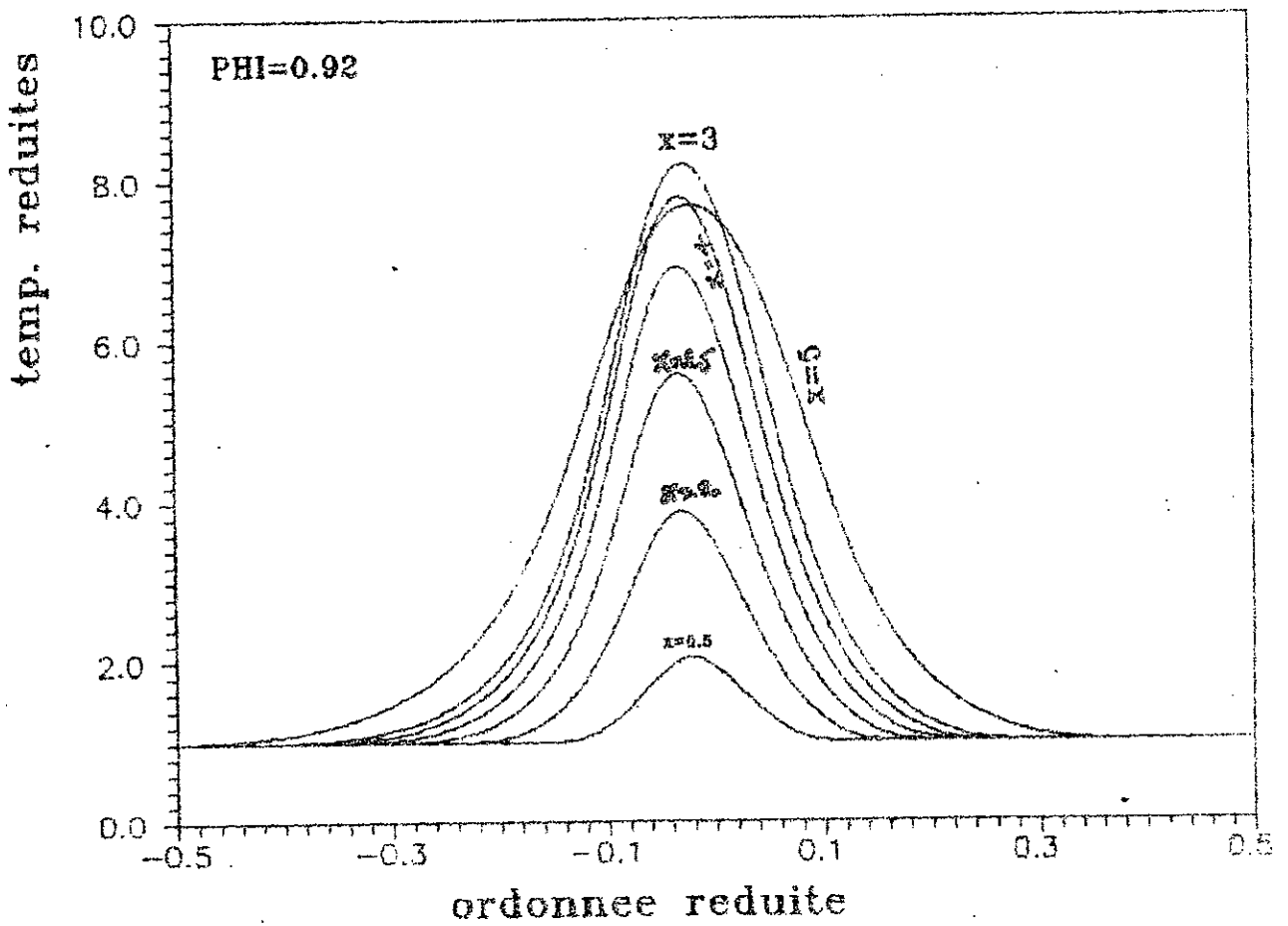
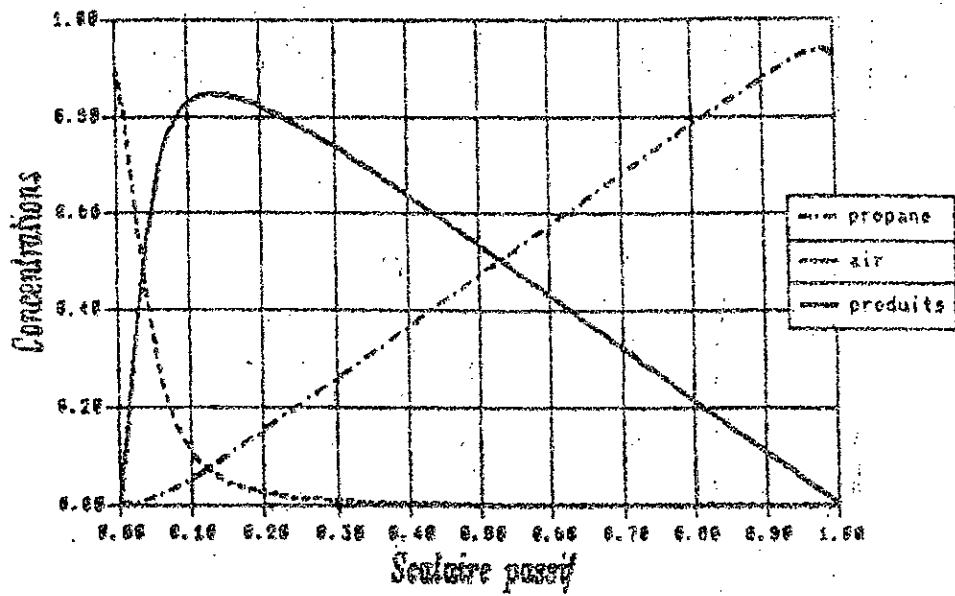


Figure 5-7: Evolution de profil de température dans la zone de mélange en fonction de l'abscisse x.



## Composition chimique



## Temperature

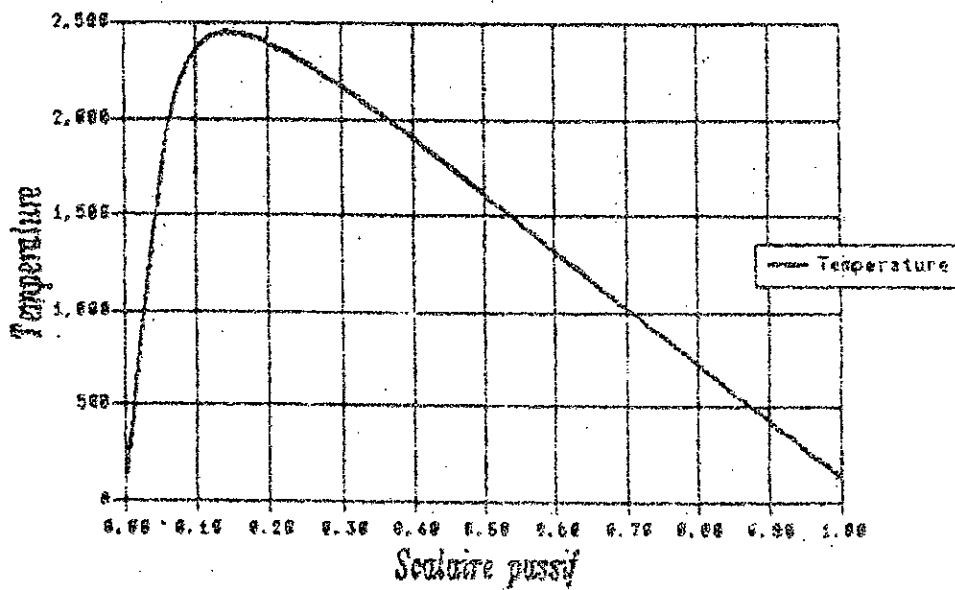


Figure 5-8: Résultat numérique pour la structure de la flamme en fonction des valeurs du scalaire passif (tiré de LACAS /26/).

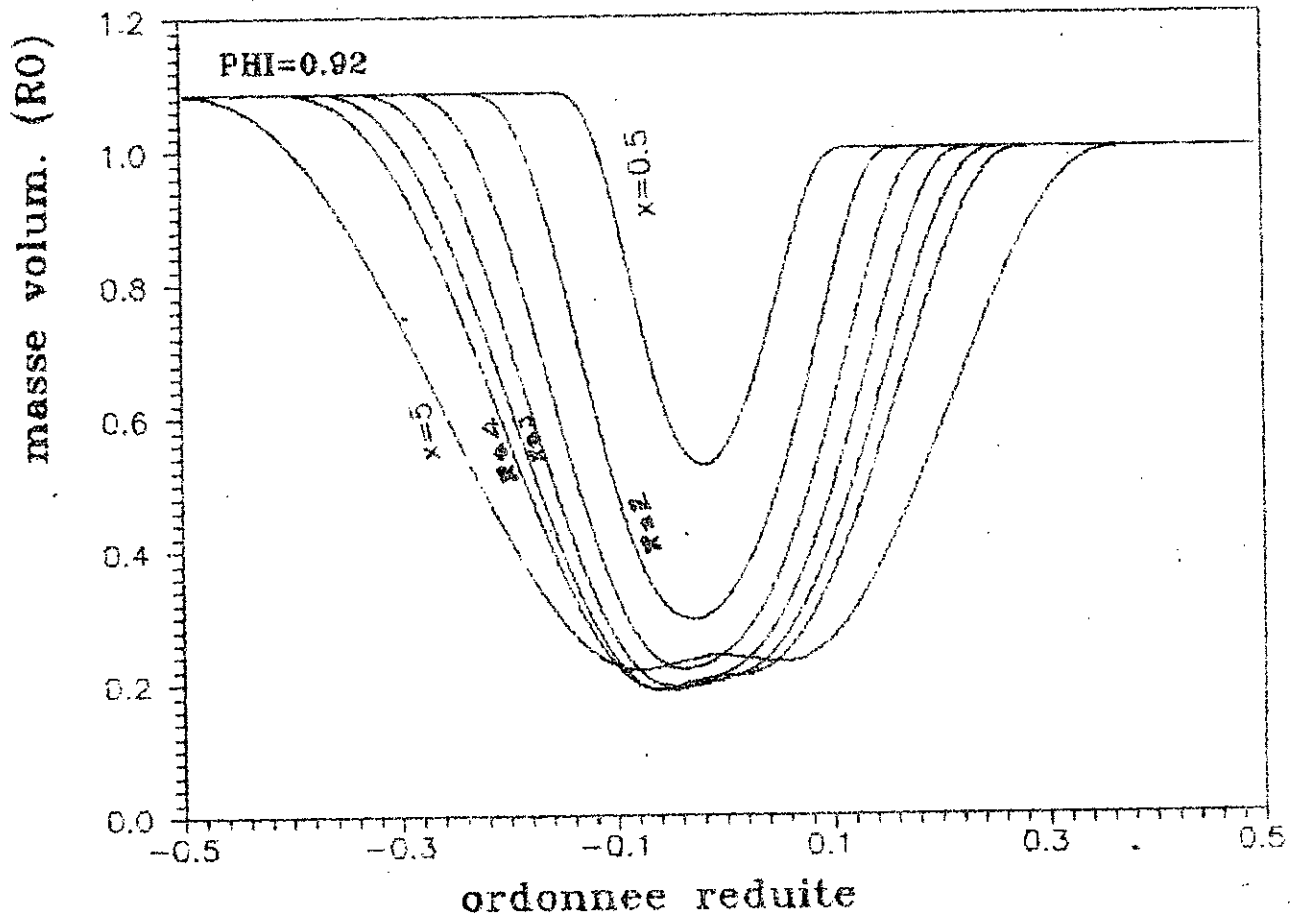


Figure 5-9: Evolution du profil de la masse volumique dans la zone de mélange en fonction de l'abscisse  $x$ .

ESPECES CHIMIQUES

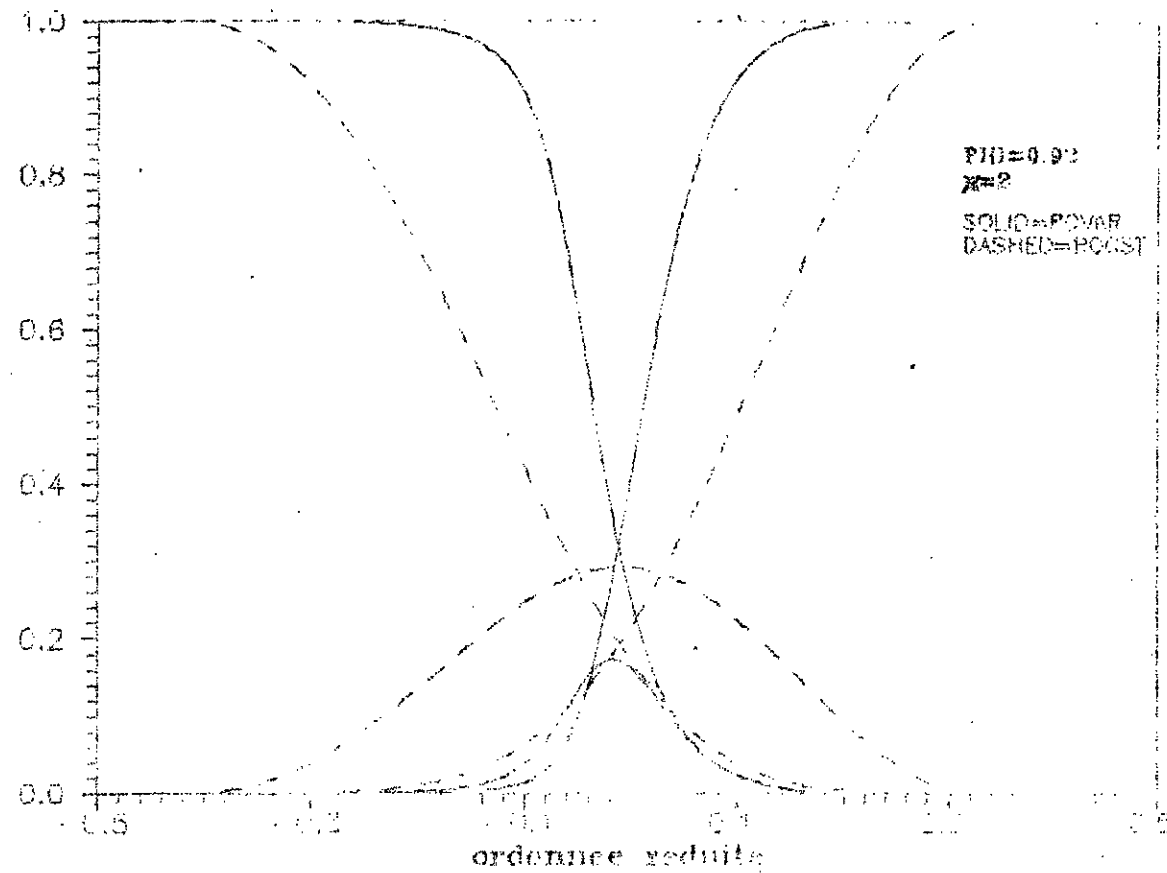


Figure 5-10: Profils de concentration des espèces chimiques à l'abscisse  $x=2$ , dans un écoulement compressible et écoulement incompressible.

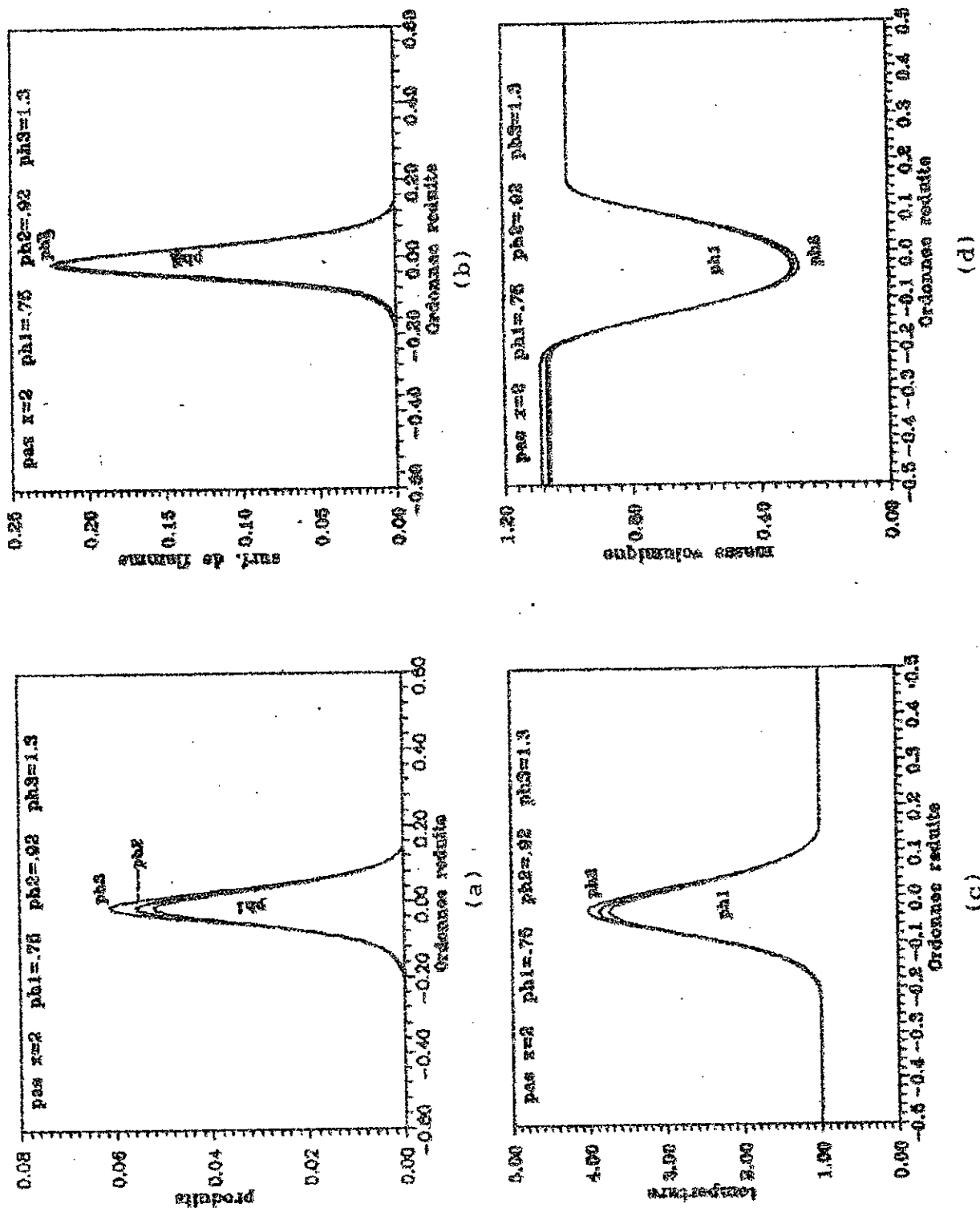


Figure 5-11: Profils des produits de réaction (a), de densité de surface de la flamme (b), de température (c), et de la masse volumique (d), en fonction de la richesse réduite  $\phi$ .

## CONCLUSION

## CONCLUSION

L'objectif que nous nous étions fixés pour cette thèse était de contribuer à l'analyse de la combustion turbulente non prémélangée, dans le cas particulier de réactifs introduits séparément dans une zone de réaction de configuration typique à celle des moteurs de fusées.

Notre approche est essentiellement liée à l'étude d'une zone de mélange réactive dans le cas d'un écoulement bidimensionnel compressible. Pour cela nous avons d'une part développé une formulation détaillée sur le plan théorique, et d'autre part modélisé une telle combustion sur le plan numérique.

Dans l'approche théorique, notre travail a consisté d'abord à rassembler une formulation générale des équations permettant la description de ce type de combustion, ceci en calculant les valeurs moyennes des grandeurs physiques considérées.

Les équations dynamiques ont été établies dans le cas des approximations de la couche limite, utilisant une fermeture de type d'équation de Saffman qui modélise les contraintes de Reynolds par l'intermédiaire de l'énergie cinétique de la turbulence et une pseudo-vorticité dont l'équation représente les structures tourbillonnaires dans la zone de cisaillement.

La détermination des taux de réaction moyens a été effectuée à l'aide du modèle de la flamme cohérente, développée initialement par Marble et Broadwell, qui décompose la flamme de diffusion en une multitude d'éléments de flammes laminaires identifiables, convectés et déformés par l'écoulement. Ce modèle utilise en particulier une équation de bilan pour la densité de surface de flamme, qui présente des termes de diffusion turbulente, un terme de production par étirement, et des termes de disparition par raccourcissement et extinction.

L'approche numérique, nous conduit à utiliser, pour la résolution, un algorithme basé sur les idées de Blottner, qui permet la résolution précise de système d'équations paraboliques.

Les résultats obtenus, donnent des indications particulièrement intéressantes en ce qui concerne les profils de chaque paramètre physique intervenant dans la combustion, en tenant compte des phénomènes très important, entre autre les variations de la masse volumique, qui joue un rôle non négligeable dans l'écoulement compressible.

Ces Résultats sont qualitativement satisfaisants, mais une expérimentation complète reste à faire pour une comparaison plus précise. Néanmoins, ces résultats restent, aussi, très proches quantitativement, de ceux de plusieurs études de combustion d'une flamme de diffusion.

Le travail qui a fait l'objet de la présente étude a donc permis de se rapprocher d'un domaine d'un intérêt capital dans l'énergétique et qui, actuellement les travaux sont loins d'être achevés :

- \* Les voies sont ouvertes pour une validation expérimentale complète du modèle de la flamme cohérente.
- \* D'autres voies numériques restent à établir, et le développement de ce code pour une flamme prémélangée est plus qu'intéressante.

Nous recommandons aussi, de se pencher vers une modélisation qui permet de tenir compte des caractéristiques géométriques des injecteurs dont essentiellement, l'effet de recirculation dans l'écoulement est présent, et qui nécessite d'en tenir compte.

En fin, on ne peut achever cette conclusion, sans en parler de la méthode de simulation numérique, qui faut la suivre de près, dont l'avenir est très prometteur dans le domaine de la combustion turbulente, et qu'actuellement se développe rapidement.

ANNEXES



1- La méthode de la fonction de densité de probabilité: (p.d.f)

L'une des méthodes les plus utilisées actuellement pour déterminer les taux de réaction moyens, utilise la fonction de densité de probabilité. Cette méthode, présentée d'une façon détaillée par **Borghì** /9/ et **Williams** /2/, sera décrite ici d'une façon simplifiée.

Soit le taux de consommation de combustible

$$\dot{\omega}_F = \dot{\omega}_F(\rho, T, Y_O, Y_F)$$

Si l'écoulement réactif considéré est stationnaire, on peut définir en tout point  $x$  une fonction de densité de probabilité:

$$P(\rho, T, Y_O, Y_F; x)$$

Ainsi  $P(\rho, T, Y_O, Y_F; x)d\rho dT dY_O dY_F$  est la probabilité d'avoir au point  $x$  un mélange dont la masse volumique, température et fractions massiques appartiennent respectivement aux intervalles  $[\rho, \rho+d\rho]$ ,  $[T, T+dT]$ ,  $[Y_O, Y_O + dY_O]$  et  $[Y_F, Y_F + dY_F]$ .

Alors, la valeur moyenne d'une fonction  $\phi$  quelconque des variables des équations de bilan s'écrit:

$$\bar{\phi} = \int \phi(\rho, T, Y_O, Y_F) P(\rho, T, Y_O, Y_F; x) d\rho dT dY_O dY_F$$

Il est plus commode d'utiliser une fonction de densité de probabilité de Favre:

$$\tilde{P}(\rho, T, Y_O, Y_F) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int \rho P(\rho, T, Y_O, Y_F; x) d\rho$$

Où, 
$$\bar{\rho} = \int \rho P(\rho, T, Y_O, Y_F; x) d\rho dT dY_O dY_F$$

Avec ces relations, on peut écrire le taux de consommation moyen par unité de masse telque:

$$\tilde{\omega}_F = \int \dot{\omega}_F(\rho, T, Y_O, Y_F) \tilde{P}(\rho, T, Y_O, Y_F; x) dT dY_O dY_F$$

## 2- Le modèle de "Eddy Break Up": (EBU)

Le modèle "Eddy Break Up" proposé par Spalding en 1971 est basé sur une analyse plus intuitive de la combustion turbulente. D'après ce chercheur la zone de combustion est formée d'une collection d'éléments de gaz frais et brûlés.

Les fluctuations turbulentes de l'écoulement participent à la fragmentation des éléments de gaz frais, alors le taux de réaction moyen est contrôlé par le temps caractéristique de fragmentation des paquets de gaz frais.

Le temps caractéristique de fragmentation peut être donné en fonction de l'énergie de dissipation  $\varepsilon$  et l'énergie cinétique turbulente  $K$  telque:

$$\tau_{EBU} = \frac{K}{\varepsilon}$$

Alors, le taux de consommation moyen de combustible par unité de masse s'écrira comme:

$$\dot{\omega}_F \sim -C_{EBU} \frac{(Y_F)^{2.5}}{\tau_{EBU}}$$

La constante  $C_{EBU} = 0.53$  est préconisée par Spalding.

En 1979 Borghi a montré que pour une situation où le fluide est composé uniquement de gaz frais ou brûlés, on peut obtenir une expression analogue à celle de Spalding:

$$\dot{\omega}_F \sim -\frac{1}{\tau} Y_{Fu} (1 - Y_{Fu})$$

avec,  $Y_{Fu}$  est la fraction molaire de combustible dans les gaz frais, et  $\tau$  une échelle intégrale de temps qui est proportionnelle à  $\tau_{EBU}$ .

Le modèle EBU est simple, et a été utilisé pour la modélisation de combustion turbulente. Cependant il n'est bien adapté qu'à des combustions contrôlées par le mélange, donc la cinétique chimique n'intervient pas, et aussi le phénomène de l'extinction ne peut être décrit.

## ANNEXE B

### DISCRETISATION DES EQUATIONS

Equation de continuite:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0$$

elle se discrétise au point  $(i+1/2, j-1/2)$  du maillage.

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial F}{\partial \xi} \right]_{i+1/2}^{j-1/2} &= \frac{1}{2} \left[ \left[ \frac{\partial F}{\partial \xi} \right]_{i+1/2}^{j-1} + \left[ \frac{\partial F}{\partial \xi} \right]_{i+1/2}^j \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[ \frac{F_{i+1}^{j-1} - F_i^{j-1}}{\Delta \xi_i} + \frac{F_{i+1}^j - F_i^j}{\Delta \xi_i} \right] \end{aligned}$$

$$\left[ \frac{\partial V}{\partial \eta} \right]_{i+1/2}^{j-1/2} = \frac{1}{\Delta \eta_{j-1}^j} \left[ V_{i+1/2}^j - V_{i+1/2}^{j-1} \right]$$

L'équation de continuité devient:

$$-A_{11} F_{i+1}^{j-1} + B_{11} F_{i+1}^j - C_{11} F_{i+1}^{j+1} - A_{12} V_{i+1/2}^{j-1} + B_{12} V_{i+1/2}^j - C_{12} V_{i+1/2}^{j+1} = D_1$$

avec:

$$\begin{aligned} A_{11} &= -\frac{1}{2\Delta \xi_i} & B_{11} &= \frac{1}{2\Delta \xi_i} & C_{11} &= 0 \\ A_{12} &= \frac{1}{\Delta \eta_{j-1}^j} & B_{12} &= \frac{1}{\Delta \eta_{j-1}^j} & C_{12} &= 0 \end{aligned}$$

$$\text{et, } D_1 = \frac{1}{2\Delta \xi_i} \left[ F_i^{j-1} + F_i^j \right]$$

Equation de quantité de mouvement:

$$F \frac{\partial F}{\partial \xi} + V \frac{\partial F}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \mu'_i \frac{\partial F}{\partial \eta} \right]$$

Où  $\mu'_i = \rho \mu_i$

Cette équation est discrétisée au point  $(i+1/2, j)$  du maillage.

$$\left[ F \frac{\partial F}{\partial \xi} \right]_{i+1/2}^j = \frac{1}{2\Delta\xi_i} \left[ 2\bar{F}_{i+1}^j F_{i+1}^j - (\bar{F}_{i+1}^j)^2 - (F_i^j)^2 \right]$$

$$\left[ V \frac{\partial F}{\partial \eta} \right]_{i+1/2}^j = V_{i+1/2}^j \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial F}{\partial \eta} \right)_{i+1}^j + \left( \frac{\partial F}{\partial \eta} \right)_i^j \right]$$

$$= V_{i+1/2}^j \frac{F_i^{j+1} - F_i^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + V_{i+1/2}^j \frac{\bar{F}_{i+1}^{j+1} - \bar{F}_{i+1}^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} \\ + \bar{V}_{i+1/2}^j \frac{F_{i+1}^{j+1} - F_{i+1}^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} - \bar{V}_{i+1/2}^j \frac{\bar{F}_{i+1}^{j+1} - \bar{F}_{i+1}^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}}$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \mu'_i \frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \right]_{i+1/2}^j = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \mu'_i \frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \right]_i^j + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \mu'_i \frac{\partial F}{\partial \eta} \right)_{i+1}^j$$

$$= \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \mu'_{i,i}^{j+1/2} \frac{F_i^{j+1} - F_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \mu'_{i,i}^{j-1/2} \frac{F_i^j - F_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right] +$$

$$+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \mu'_{i,i+1}^{j+1/2} \frac{F_{i+1}^{j+1} - F_{i+1}^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \mu'_{i,i+1}^{j-1/2} \frac{F_{i+1}^j - F_{i+1}^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right]$$

L'équation discrétisée devient :

$$-A_{21,i+1}^{j-1} F_{i+1}^{j-1} + B_{21,i+1}^j F_{i+1}^j - C_{21,i+1}^{j+1} F_{i+1}^{j+1} - A_{22,i+1/2}^{j-1} V_{i+1/2}^{j-1} + B_{22,i+1/2}^j V_{i+1/2}^j - C_{22,i+1/2}^{j+1} V_{i+1/2}^{j+1} = D_2$$

Avec:

$$A_{21} = \frac{\bar{V}_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{\mu_{i+1}^{j-1/2}}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2} \Delta\eta_{j-1}^j}$$

$$B_{21} = \frac{\bar{F}_{i+1}^j}{\Delta\xi_i} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \frac{\mu_{i+1}^{j+1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}} + \frac{\mu_{i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right]$$

$$C_{21} = -\frac{\bar{V}_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{\mu_{i+1}^{j+1/2}}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2} \Delta\eta_j^{j+1}}$$

$$A_{22} = C_{22} = 0$$

$$B_{22} = \frac{F_i^{j+1} - F_i^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{\bar{F}_{i+1}^{j+1} - \bar{F}_{i+1}^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}}$$

$$D_2 = \frac{(\bar{F}_{i+1}^j)^2 - (F_i^j)^2}{2\Delta\xi_i} + \bar{V}_{i+1/2}^j \frac{\bar{F}_{i+1}^{j+1} - \bar{F}_{i+1}^{j-1}}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}}$$

$$+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \mu_{i+1}^{j+1/2} \frac{F_i^{j+1} - F_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \mu_{i+1}^{j-1/2} \frac{F_i^j - F_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right]$$

Equations de fermeture:

Le modèle de Saffman nécessite la résolution non linéaire des termes  $K$ ,  $\omega$  (énergie cinétique, et la pseudo-vorticité) qui interviennent sous les formes :  $K$ ,  $\omega$ ,  $\omega^2$ ,  $\omega^3$  et  $K/\omega$ .

Pour simplifier la linéarisation de ces termes nous posons:

$$\Omega = \omega^2 \rightarrow \omega = \sqrt{\Omega} \quad , \quad K/\omega = \frac{\bar{K}}{\sqrt{\Omega}} \quad \text{et} \quad \omega^3 = \omega \omega^2 = \sqrt{\Omega} \Omega$$

Où  $\bar{K}$  et  $\bar{\Omega}$  sont déterminés au plan précédent.

a) Equation de transport de la pseudo-vorticite:

$$F \frac{\partial \Omega}{\partial \xi} + V \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} = \alpha' \Omega \left| \frac{\partial F}{\partial \eta} \right| - \beta' \sqrt{\bar{\Omega}} \Omega + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \gamma \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right)$$

$$\text{Avec } \gamma = \frac{A}{\sigma \omega} \frac{\bar{K}}{\sqrt{\bar{\Omega}}} + \mu$$

La discrétisation de cette équation se fait au point  $(i+1/2, j)$ :

$$\left[ F \frac{\partial \Omega}{\partial \xi} \right]_{i+1/2}^j = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} (\Omega_{i+1}^j - \Omega_i^j)$$

$$\left[ V \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right]_{i+1/2}^j = \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (\Omega_{i+1}^{j+1} - \Omega_{i+1}^{j-1} + \Omega_i^{j+1} - \Omega_i^{j-1})$$

$$\left[ \Omega \left| \frac{\partial F}{\partial \eta} \right| \right]_{i+1/2}^j = \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (\Omega_{i+1}^j |F_{i+1}^{j+1} - F_{i+1}^{j-1}| + \Omega_i^j |F_i^{j+1} - F_i^{j-1}|)$$

$$\left[ \sqrt{\bar{\Omega}} \Omega \right]_{i+1/2}^j = \frac{1}{2} \left[ (\Omega_i^j)^{3/2} + \sqrt{\bar{\Omega}_{i+1}^j} \Omega_{i+1}^j \right]$$

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \gamma \frac{\partial \Omega}{\partial \eta} \right) \right]_{i+1/2}^j &= \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ \gamma_i^{j+1/2} \frac{\Omega_i^{j+1} - \Omega_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \gamma_i^{j-1/2} \frac{\Omega_i^j - \Omega_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\} \\ &+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ \gamma_{i+1}^{j+1/2} \frac{\Omega_{i+1}^{j+1} - \Omega_{i+1}^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \gamma_{i+1}^{j-1/2} \frac{\Omega_{i+1}^j - \Omega_{i+1}^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\} \end{aligned}$$

L'équation discrétisée s'écrit alors:

$$-A_{11} \Omega_{i+1}^{j-1} + B_{11} \Omega_{i+1}^j - C_{11} \Omega_{i+1}^{j+1} - A_{12} K_{i+1}^{j-1} + B_{12} K_{i+1}^j - C_{12} K_{i+1}^{j+1} = D_1$$

Avec:

$$A_{11} = \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\gamma_{i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^j}$$

$$B_{11} = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} - \alpha' \frac{|F_{i+1}^{j+1} - F_{i+1}^{j-1}|}{2\Delta\eta_{i-1}^{j+1}} + \frac{\beta}{2} \sqrt{\bar{\Omega}_{i+1}^j}$$

$$+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \frac{\gamma_{i+1}^{j+1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}} + \frac{\gamma_{i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_j^{j-1/2}} \right]$$

$$C_{11} = -\frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\gamma_{i+1}^{j+1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}}$$

$$\text{et, } A_{12} = B_{12} = C_{12} = 0$$

$$D_1 = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} \Omega_i^j - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (\Omega_i^{j+1} - \Omega_i^{j-1}) + \alpha' \frac{F_i^{j+1} - F_i^{j-1}}{2\Delta\eta_{i-1}^{j+1}} \Omega_i^j$$

$$- \frac{1}{2} (\Omega_i^j)^{3/2} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ \gamma_i^{j+1/2} \frac{\Omega_i^{j+1} - \Omega_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \gamma_i^{j-1/2} \frac{\Omega_i^j - \Omega_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\}$$

b) Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente K:

$$F \frac{\partial K}{\partial \xi} + V \frac{\partial K}{\partial \eta} = \alpha'' K \left| \frac{\partial F}{\partial \eta} \right| - \beta'' K \omega + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \delta \frac{\partial K}{\partial \eta} \right)$$

$$\text{Avec } \delta = \frac{A}{\sigma_K} \frac{\bar{K}}{\omega} + \mu$$

Cette équation s'écrit d'une façon semblable à celle de la pseudo-vorticité et se discrétise au point  $(i+1/2, j)$ , sous la forme:

$$-A_{21} \Omega_{i+1}^{j-1} + B_{21} \Omega_{i+1}^j - C_{21} \Omega_{i+1}^{j+1} - A_{22} K_{i+1}^{j-1} + B_{22} K_{i+1}^j - C_{22} K_{i+1}^{j+1} = D_2$$

$$\text{Avec, } A_{21} = B_{21} = C_{21} = 0$$

$$A_{22} = \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\delta_{i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^j}$$

$$B_{22} = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} - \alpha'' \frac{|F_{i+1}^{j+1} - F_{i+1}^j|}{2\Delta\eta_{i-1}^{j+1}} + \frac{\beta}{2} \sqrt{\Omega_{i+1}^j} \\ + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \frac{\delta_{i+1}^{j+1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}} + \frac{\delta_{i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} \right]$$

$$C_{22} = - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\delta_{i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}}$$

$$D_2 = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} \Omega_i^j - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (K_i^{j+1} - K_i^{j-1}) + \alpha'' \frac{F_i^{j+1} - F_i^{j-1}}{2\Delta\eta_{i-1}^{j+1}} K_i^j \\ - \frac{1}{2} (\Omega_i^j)^{1/2} K_i^j + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ \delta_{i+1}^{j+1/2} \frac{K_i^{j+1} - K_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \delta_{i+1}^{j-1/2} \frac{K_i^j - K_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\}$$

Equations chimiques: (modèle de la flamme cohérente)

Analogues aux équations de transport de  $K$ ,  $\omega^2$  ainsi que l'équation de quantité de mouvement les équations chimiques se discrétisent au point  $(i+1/2, j)$  du maillage.



a) Consevation de l'espece:

$$F \frac{\partial Y_k}{\partial \xi} + V \frac{\partial Y_k}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \nu_k \frac{\partial Y_k}{\partial \eta} \right) - V_k \Sigma \quad k=1,2,3$$

$$\text{Avec } \nu_k = \frac{\mu'_i + \nu'_i}{\sigma_k}$$

$$-A_{kk} (Y_k)_{i+1}^{j-1} + B_{kk} (Y_k)_{i+1}^j - C_{kk} (Y_k)_{i+1}^{j+1} + B_{4k} \Sigma_{i+1}^j = D_k$$

$$A_{kk} = \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\nu_{k i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^j}$$

$$B_{kk} = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \frac{\nu_{k i+1}^{j+1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}} + \frac{\nu_{k i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} \right]$$

$$C_{kk} = - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\nu_{k i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}}$$

$$B_{4k} = \frac{V_{k i+1}^j}{2}$$

$$D_k = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} Y_{k i}^j - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (Y_{k i}^{j+1} - Y_{k i}^{j-1}) - \frac{V_{k i}^j}{2} \Sigma_i^j$$

$$+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ \nu_{k i}^{j+1/2} \frac{Y_{k i}^{j+1} - Y_{k i}^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \nu_{k i}^{j-1/2} \frac{Y_{k i}^j - Y_{k i}^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\}$$

Equation de bilan de densite de flamme:

Cette équation a pour forme:

$$F \frac{\partial \Sigma}{\partial \xi} + V \frac{\partial \Sigma}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ v_4 \frac{\partial \Sigma}{\partial \eta} \right] + \varepsilon' \Sigma - \beta V_4 \Sigma^2$$

$$\text{Avec } v_4 = \frac{\mu_l' + \mu'}{\sigma_\Sigma}, \quad \varepsilon' = \rho \varepsilon \quad \text{et } V_4 = \left( \frac{V_{D1}}{Y_1} + \frac{V_{D2}}{Y_2} \right)$$

Elle se discrétise sous la forme:

$$- A_{44} \Sigma_{i+1}^{j-1} + B_{44} \Sigma_{i+1}^j - C_{44} \Sigma_{i+1}^{j+1} = D_4$$

Où,

$$A_{44} = \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{v_{4\ i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^j}$$

$$B_{44} = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ v_{4\ i+1}^{j+1/2} \frac{1}{\Delta\eta_j^{j+1}} + v_{4\ i+1}^{j-1/2} \frac{1}{\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} \right\} - \frac{\varepsilon_{i+1}^j}{2} + \beta V_{4\ i+1}^j \Sigma_{i+1}^j$$

$$C_{44} = - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{v_{4\ i+1}^{j-1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}}$$

$$D_k = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} \Sigma_i^j - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (\Sigma_i^{j+1} - \Sigma_i^{j-1}) + \frac{\varepsilon_i^j}{2} \Sigma_i^j$$

$$+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ v_{4\ i}^{j+1/2} \frac{\Sigma_i^{j+1} - \Sigma_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - v_{4\ i}^{j-1/2} \frac{\Sigma_i^j - \Sigma_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\}$$

$$- \frac{\beta}{2} V_{4\ i}^j (\Sigma_i^j)^2 + \frac{\beta}{2} V_{4\ i+1}^j (\Sigma_i^j)^2$$

$$\text{Avec } \varepsilon_{i+1}^j = \alpha \frac{|F_{i+1}^{j+1} - F_{i+1}^{j-1}|}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} \quad \text{et } V_4 |_{i+1}^j = \left( \frac{V_1 |_{i+1}^j}{Y_1} + \frac{V_2 |_{i+1}^j}{Y_2} \right)$$

Equation d'energie:

$$F \frac{\partial T}{\partial \xi} + V \frac{\partial T}{\partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \nu_s \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) + \Gamma \Sigma$$

$$\text{Avec } \nu_s = \frac{\mu_t + \mu'}{\sigma_h} \quad \text{et } \Gamma = \frac{Q V_D}{C_p T_0}$$

Où,

$$A_{SS} = \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\nu_s^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^j}$$

$$B_{SS} = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left[ \frac{\nu_s^{j+1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}} + \frac{\nu_s^{j-1/2}}{\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} \right]$$

$$C_{SS} = - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} + \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \frac{\nu_s^{j-1/2}}{\Delta\eta_j^{j+1}}$$

$$D_S = \frac{F_{i+1}^j + F_i^j}{2\Delta\xi_i} T_i^j - \frac{V_{i+1/2}^j}{2\Delta\eta_{j-1}^{j+1}} (T_i^{j+1} - T_i^{j-1}) + \frac{\Gamma_i^j}{2} \Sigma_i^j$$

$$+ \frac{1}{2\Delta\eta_{j-1/2}^{j+1/2}} \left\{ \nu_s^{j+1/2} \frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\Delta\eta_j^{j+1}} - \nu_s^{j-1/2} \frac{T_i^j - T_i^{j-1}}{\Delta\eta_{j-1}^j} \right\}$$

REFERENCES

BIBLIOGRAPHIQUES

## REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- /1/ M. Barrère, R. Prudhomme ; " Equations fondamentales de l'Aerothermochimie ", Masson, Paris, 1973.
- /2/ F.A. Williams ; " Combustion theory ", Benjamin & Ennmings, Menlo Park, C.A., 1985.
- /3/ E. Esposito ; " Combustion ", Cours ECP, 1985-1986.
- /4/ D. Vaynante ; " Etude numerique et experimentale d'une zone de mélange réactive ", Thèse de Doctor. Ing. ECP, 1985.
- /5/ J.A. Schetz ; " Injection and mixing in turbulent flow ", Progress Astronaut. and aeronaut., vol. 68, pp.12-14, 1972.
- /6/ T. Cebeci, P. Bradshaw ; " Momentum transfer in boundary layers ", Hemispher publishing co., Mc Graw. Hill, 1977.
- /7/ E.E. O'brien ; " Turbulent mixing of two rapidly reacting chemical species ", J. F. Mech. 148, pp.349-382, 1984.
- /8/ T.E. Alber, E.G. Batt ; " Diffusion limited chemical reactions in turbulent shear layer ", AIAA Journ. 14, pp.70-76 , 1976.
- /9/ R. Borghi ; "Models of turbulent combustion for numerical prediction , in prediction methods for turbulent flows ", Lectures Serie 1972-2, Van Karman inst., Belgique, 1972.
- /10/ F.A. Libby, F.A. Williams ; " Turbulent reacting flows ", topics in applied physics, Springer Verlag, New York, 1981.
- /11/ W.P. Jones, J.H. Whitelaw ; " Calculation methods for reacting turbulent: A Review ", Comb. flame, N°48, pp.1-26, 1982.
- /12/ F.E. Marble, J.E. Broadwell ; " The coherent flame model of non premixed combustion ", Project Squid Report, TRW-9-PU, 1977.
- /13/ N. Darabiha ; " Un modèle de flamme cohérente pour la combustion prémélangée :Analyse d'un foyer turbulent à élargissement brusque", Thèse de Doctor. Ing., E.C.Paris, 1984.
- /14/ Y. Sadallah ; " Analyse du jet de réchauffe d'un turbo-réacteur ", Thèse de Doctorat, E.C.P, Paris, 1984.
- /15/ F.G. Blottner ; " Introduction to computational technique for boundary layers ", Sandia lab., Albuquerque, New Mexico 87/85, April 1981.

- /16/ V. Giovangigli ; Thèse de Doctorat d'Etat, Paris VI, 1988.
- /17/ P. Bradshaw ; " Topics in applied physics : Turbulence ", Springer Verlag, New York , 1976.
- /18/ A. Favre ; " Statistical equation of turbulent gases, in problems of hydrodynamics and continuum mechanics ", Society for society for indus. and applied mechnics, pp.231-266, 1969.
- /19/ R.W. Bilger ; " A note on Favre averaging in variable density flows ", Comb. Sci. and techn., vol. 4, pp.215-217, 1975.
- /20/ T. Cebeci, A.M.O. Smith, G.J. Mozinski ; " Solution of the incompressible boundary layer equations with heat transfer ", J. of Heat transfer, vol. 92, pp.499
- /21/ B.S. Balwin, H. Lomax ; " Thin layer approximation and algebraic model for separated flows ", AIAA paper 78-257, 1978.
- /22/ F.G. Saffman ; " Model equation for turbulent shear flow ", Studies in applied mathematics , vol. 53, n°1, 1974.
- /23/ J. Warnatz ; " Calculation of the structure of laminar flat flames ", Ber. Bunsenges phys. chem., vol 82, pp.643-649, 1978.
- /24/ N. Darabiha, V. Giovangigli, A. Trouve, S.M. Candel ; " Coherent flame description of turbulent duct flame " , Workshop on turbulent combustion , Rouen , 1987.
- /25/ V. Giovangigli, M. Smooke ; " Extinction of strained premixed laminar flames with complex chemistry " , Comb. sci. and techn. , vol 53, pp.23-49 , 1987.
- /26/ F. Lacas ; " Modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente dans les moteurs fusée cryotechniques ", Thèse de Doctor. Ing., E.C.Paris, 1989.
- /27/ E. Maistret, N.Darabiha, T. Poinsot, et al ; " Recent developments in the coherent flamelet description of turbulent combustion " , 3<sup>rd</sup> Inter. confer. on num. comb., Antibes , 1989.
- /28/ G. Brown, A. Rozhko ; " The effect of density difference on the turbulent mixing layer " , California Inst. of technology, Pasadena , California, 9/103
- /29/ R.A. Allison, J.F. Clarke ; " Theory of a Hydrogen-Oxygen diffusion flame " , Combust. sci. techno. , vol. 23 , pp.113-123, 1980.

- /30/ **J.W. Daily, W.T. Lundquist** ; " Three dimensional structure in a turbulent combusting mixing layer ", Inter. symp. comb., Michigan, 1984.
- /31/ **M.G. Mungal, P.E. Dimotakis, J.E Broadwell** ; " Turbulent mixing and combustion in a reacting shear layer ", 21<sup>st</sup> Aer. sci. meet., AIAA-83-0473, 1983.
- /32/ **J. Boussinesq** ; "Essai sur la théorie des eaux courantes", Mem. Acad. des sciences, N° 23, pp.680, Paris, 1877.
- /33/ **M. Nishioka, T.Takeno, S.Ishizuka** ; " Effects of variable density on a tubular flame ", Comb. and flame 73, pp.287-301, 1988.
- /34/ **D.A. Anderson, J.C. Tannehill, R.N. Pletcher** ; " Numerical methods for the PNS equations ", Comput. Fluid. Mech. and heat transfer , pp.417-477, 1988.
- /35/ **D.B. Spalding** ; " Genmix, a general computer program for two-dimensional parabolic phenomena ", HTS serie, N°1, Pergamon press, Oxford, 1977.
- /36/ **H.B. Keller, T. Cebeci** ; " Accurate numerical methods for boundary layer flows : Two dimensional turbulent flows ", AIAA journal, N° 9, pp.1193-1199, 1972.
- /37/ **A.N. Kolmogorov** ; " Structure locale de la turbulence dans un fluide incompressible visqueux aux très grands nombres de Reynolds ", CRAS, 30, N°4, pp.299-303, 1941.
- /38/ **O. Reynolds** ; " An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels ", Phil., Trans. Roy. Soc., 174, pp.935-982, 1883.
- /39/ **W.P. Jones** ; " Models for turbulent flows with variable density and combustion ", in prediction methods for turbulent flows, lecture series, 2, Van Karman Inst., Rhod St Genesse, Belgique, 1979.
- /40/ **W. Rodi** ; "Turbulence Models for environmental problems", in prediction Methods for turbulent flows, Lecture series 2, Van Karman Inst., Rhode St Genesse, Belgique, 1979.
- /41/ **N. Peters** ; " laminar flamelet concepts in turbulent combustion ", 21<sup>st</sup> symp. on combustion, 1986.