

Chapitre 2 : La combustion et la turbulence

2.1 Introduction

La combustion est encore aujourd'hui l'un des principaux moyens de production de l'énergie, que ce soit pour les transports aériens, spatiaux, routiers ou pour la production d'électricité. La plus grande partie de cette énergie est issue de combustibles fossiles dont les ressources sont limitées. Par ailleurs, la combustion de ces hydrocarbures entraîne la production d'espèces polluantes pour l'environnement, à l'échelle locale mais aussi planétaire (destruction de la couche d'ozone par les oxydes d'azote et réchauffement global par le dioxyde de carbone). Dans ce cadre général les industriels du secteur de l'énergie et des transports cherchent à perfectionner les procédés de combustion dans le but d'une part de réduire leur consommation en combustible et d'autre part de limiter leur production d'espèces polluantes. Ces objectifs, qui représentent des enjeux majeurs pour l'énergétique, nécessitent des recherches sur les aspects fondamentaux et technologiques.

Ces recherches consistent en particulier à étudier les couplages entre les différents phénomènes physiques intervenant dans les chambres de combustion, sachant que dans les moteurs ou les installations industrielles, comme les turbines à gaz ou les turboréacteurs, la combustion est fortement affectée par le caractère turbulent des écoulements. Cette interaction entre combustion et turbulence est étudiée depuis le début du siècle dernier et donne lieu aujourd'hui à de nombreux sujets de recherche sur les trois aspects expérimental, théorique et numérique. Depuis quelques décennies, par le développement des modèles et des techniques de calcul et de la puissance des ordinateurs, les études numériques de la combustion turbulente prennent une place de plus en plus importante.

En particulier, de telles études ont conduit la plupart des grands groupes industriels et les organismes de recherche à développer des logiciels permettant la simulation numérique de ces écoulements dans des configurations plus ou moins complexes tant du point de vue de la géométrie des systèmes envisagés que des processus pris en compte. La simulation numérique de configurations industrielles telles que la combustion dans les turbines à gaz, ne peut se faire aujourd'hui encore qu'en modélisant une partie des phénomènes physiques mis en jeu. Ces travaux de modélisation sont nécessaires du fait de la grande disparité des échelles des différents phénomènes physiques en regard de celles qui caractérisent les configurations considérées. La simulation directe de l'ensemble de ces phénomènes, c'est-à-dire sans modéliser une partie d'entre eux, pour une géométrie de chambre de combustion réelle demanderait un beaucoup temps de calcul et une quantité de mémoire grande. Les modèles qu'il faut développer pour permettre le calcul des quantités moyennes ou filtrées, doivent néanmoins tenir compte des différents mécanismes physiques qui peuvent se produire aux petites échelles dans ces chambres de combustion et notamment du mécanisme de mélange des gaz en présence. En particulier, les mélanges réactifs combustible-air au sein des chambres de combustion sont rarement homogènes : la richesse des mélanges y est variable en temps et en espace et la combustion conduit à la propagation de flammes dans des prémélanges partiels et non parfaits.

2.2 Phénomènes physiques concernant le problème

L'interaction entre un processus chimique de combustion et la turbulence joue un rôle très important dans la plupart des systèmes de combustion, pour la propulsion ou la production d'énergie. L'étude de ces écoulements turbulents de gaz réactifs a conduit à l'introduction de différentes grandeurs caractéristiques de ces phénomènes physiques.

Ces quantités sont issues de la mécanique des fluides, de la thermodynamique et de la chimie.

L'objectif de ce chapitre est de rappeler les phénomènes physiques mis en jeu et les équations décrivant l'évolution des grandeurs caractéristiques. La résolution de ces équations qui représentent les différents phénomènes physiques et mécaniques et leurs interactions, doit permettre de prédire la structure et l'évolution des écoulements turbulents réactifs. Compte tenu de la complexité de ces équations et des outils mathématiques dont nous disposons, la résolution analytique de ces équations est limitée à des cas très simples et dans la plupart des cas, des méthodes numériques de résolution approchée sont nécessaires. Cependant, la résolution directe, sans hypothèse simplificatrice, des équations nécessite une puissance de calcul très importante car les phénomènes physiques étudiés font intervenir un nombre important de variables et un large spectre d'échelles caractéristiques, allant des échelles de la géométrie de la chambre de combustion jusqu'à celles associées aux effets de la cinétique chimique. La puissance de calcul des machines actuelles n'est toujours pas suffisante pour simuler de façon directe des configurations réelles.

Une solution à ce problème consiste à filtrer une partie de la dynamique des phénomènes physiques mis en jeu. Les grandeurs caractéristiques que nous sommes en mesure de calculer sont alors des quantités filtrées ou moyennées et l'écriture des équations décrivant leur évolution fait apparaître des termes inconnus qui doivent être modélisés.

2.2.1 Les caractéristiques de la turbulence

Quand le nombre de Reynolds caractéristique augmente, des perturbations s'amplifient, donnent naissance à des instabilités et l'écoulement devient turbulent.

Les caractéristiques principales de la turbulence sont les suivantes

- incertitude (de mesure, de calcul)
- grande variété des échelles spatiales (des tailles de tourbillons) dans l'écoulement
- caractère aléatoire, désordonné, chaotique, fluctuant; redistribution des fluctuations dans l'espace
- imprévisibilité, non déterminisme, grande sensibilité aux conditions aux limites : si il existe de très petites différences à l'état initial, elles vont s'amplifier sous l'effet d'interactions non linéaires (exemple bien connu de la météorologie qui n'est pas prévisible à plus de quelques jours, car on ne connaît jamais suffisamment précisément l'état initial). Les cyclones par exemple se déclenchent à quelques dixièmes de degrés de température près. Ceci est valable aussi bien en calcul qu'en essai.
- augmentation du mélange : forte diffusion des quantités transportées (exemple : la température dans un fluide, la fumée, la quantité de mouvement, etc.)

- très large gamme de longueur d'ondes : tourbillons présents de tailles très variées (pour un avion : de quelques microns à quelques centaines de mètres, pour la turbulence atmosphérique : de quelques millimètres à quelques milliers de kilomètres)
- le bruit : les écoulements turbulents sont bruyants du fait des sources acoustiques créées par les fluctuations de pression dans le fluide (l'expérience du tube de Poiseuille).

Les effets de la turbulence sont parfois positifs, parfois négatifs :

- effets positifs : l'augmentation du mélange permet d'améliorer la combustion par exemple, d'améliorer la portance des avions, de réduire la température
- effets négatifs : diffusion de la pollution

Et pourtant, certaines grandeurs macroscopiques sont bien reproductibles. Par exemple :

- traînée et portance d'une voiture dans une soufflerie donnée
- débit d'une conduite à haut Reynolds
- puissance d'un moteur à combustion
- portance et traînée d'un avion

2.2.2 Combustion et Flammes

2.2.2.1 Notion de Cinétique Chimique

Un processus chimique de combustion est en fait une succession de coupures et de créations de liaisons entre les molécules. Chaque coupure et/ou création de liaison est une réaction élémentaire, l'ensemble des réactions élémentaires constitue le mécanisme cinétique du processus réactionnel. L'état final du processus réactionnel correspond à l'équilibre chimique, la composition du mélange est alors définie par les lois de la thermodynamique. Suivant les conditions de température et de pression de l'état final, des espèces chimiques apparaissent ou disparaissent. Certaines espèces produites, même en très faible proportion, ont une grande importance : c'est le cas de certaines espèces polluantes (oxyde d'azote, monoxyde de carbone ...).

Les étapes élémentaires sont caractérisées par leur taux de réaction Ω_i qui permet de calculer l'effet de la réaction sur chaque espèce. Ω_i traduit la variation de l'espèce i au cours du temps. Le taux de réaction élémentaire est égal au produit d'une constante de vitesse par les concentrations des espèces réactives, élevées chacune à une puissance qui correspond à leur coefficient stœchiométrique. La constante de vitesse dépend de la température et est le plus souvent exprimée par une loi d'Arrhénius :

$$r = BT^\alpha \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = BT^\alpha \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad \dots (2.1)$$

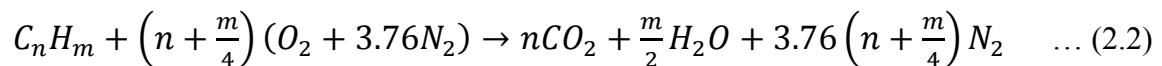
Où r est la constante de vitesse, B le coefficient pré-exponentiel, R la constante des gaz parfaits, E_a l'énergie d'activation et $T_a = E_a/R$ la température d'activation. L'énergie d'activation représente la quantité d'énergie à apporter au système considéré pour que les espèces puissent réagir de façon significative.

Dans les systèmes gazeux réactifs, le processus réactionnel est composé de réactions élémentaires en chaîne : une première réaction produit des espèces qui vont amorcer la chaîne

en réagissant de nouveau avec les réactifs initiaux et en déclenchant de nouvelles réactions élémentaires. Les réactifs initiaux vont être très vite consommés dès qu'une toute petite quantité du produit de la première réaction élémentaire apparaît [7].

Le processus réactionnel d'une combustion peut faire intervenir des centaines d'espèces et des milliers de réactions élémentaires, pour lesquelles il faut connaître les constantes des lois cinétiques dont les valeurs sont déterminées expérimentalement. Des logiciels utilisent des tabulations très détaillées de ces constantes.

Les milliers de réactions élémentaires qui interviennent dans le processus réactionnel n'agissent pas toutes à la même vitesse, certaines ont des taux beaucoup plus forts que d'autres. Cette disparité de temps caractéristiques permet de bâtir des schémas réactionnels simplifiés. Ces schémas réduits permettent de diminuer le temps de calcul et sont tout à fait pertinents lorsqu'on ne s'intéresse qu'à un petit nombre d'espèces. La façon la plus simple d'écrire un processus réactionnel est d'exprimer le passage d'un état initial à un état final sous la forme d'une réaction globale. Soit, par exemple, pour la combustion d'un hydrocarbure dans l'air à la stœchiométrie :



Le taux de disparition du carburant peut s'exprimer en utilisant une loi d'Arrhénius (empirique), pour la réaction globale, soit :

$$\Omega_Y = Y_{C_nH_m}^a Y_{O_2}^b B T^c \exp\left(\frac{T_a}{T}\right) \quad \dots (2.3)$$

$Y_{C_nH_m}$ est la fraction massique de l'hydrocarbure, Y_{O_2} la fraction massique d'oxygène, Ω_Y le taux de disparition exprimé en kilogramme d'hydrocarbure par kilogramme de mélange et par seconde. L'utilisation d'une réaction globale ne permet évidemment pas de représenter les processus de cinétique chimique réels, formés de réactions bi et tri moléculaires et faisant intervenir de nombreuses espèces intermédiaires.

Dans le cas des flammes, le processus réactionnel de la combustion est globalement exothermique, c'est pour cette raison qu'il peut engendrer une flamme [7].

2.2.2.2 Modes de combustion élémentaires

Il existe un nombre important de techniques menant à la combustion d'un carburant par un oxydant.

Dans la combustion gazeuse, deux modes de combustion élémentaires peuvent être identifiés : la combustion prémélangée et la combustion non prémélangée. Entre ces deux modes de combustion élémentaires se trouvent différents modes de combustion intermédiaires, comme le prémélange partiel ou la combustion stratifiée [8].

– **La combustion prémélangée** est un mode de combustion où le carburant et l'oxydant sont prémélangés avant d'atteindre le front de flamme. Ce mode est souvent utilisé en régime pauvre (le carburant est en quantité inférieure aux conditions stœchiométriques), permettant ainsi d'augmenter le rendement du système de combustion et de réduire la production d'oxydes d'azote, polluant très nocif dont on veut limiter la production. En contrepartie, les

flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser, nécessitant l'utilisation de dispositifs complexes d'accrochage de flamme. De même, la question du stockage d'un mélange air/carburant dans la gamme de flammabilité est prépondérante et n'est pas envisageable dans un contexte industriel.

– **La combustion non prémélangée** est un mode de combustion où le carburant et l'oxydant sont injectés par deux courants différents, le front de flamme se positionnant à la rencontre des deux lignes de courant. Ce mode de combustion, qui est donc plus facile à maîtriser, a le désavantage de former plus de polluants, du fait des hautes températures atteintes dans le front de flamme.

– **La combustion partiellement prémélangée** est un mode de combustion intermédiaire retrouvé fréquemment dans les applications industrielles. Pour des raisons de sécurité, l'oxydant et le carburant sont stockés séparément (l'oxydant est par ailleurs bien souvent pris dans l'environnement extérieur et n'est pas stocké par le système de combustion). L'oxydant et le carburant sont donc injectés par deux courants différents, en amont du front de flamme, et sont supposés se mélanger avant d'atteindre le front de flamme. Mais il arrive très fréquemment que le mélange ne soit pas parfait et que des hétérogénéités de mélange atteignent le front de flamme.

Dans un autre sens, il est envisageable que les deux courants d'un système non prémélangé se mélangent avant d'atteindre le front de flamme. Ainsi le mode de combustion n'est plus non prémélangé mais partiellement prémélangé.

Mode de combustion	Avantages	Inconvénients
Prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre)	Instabilités de combustion, stockage du mélange
Non prémélangé	Stabilité de la flamme, stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Production d'oxydes d'azote
Partiellement prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre), stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Instabilités de combustion, hétérogénéité de mélange

Tab 2.1 Résumé des avantages et inconvénients principaux des trois modes de combustions présentés.

2.2.2.3 Les Différents Types de Flammes

La réaction globale, Eq. (1.2), montre que pour qu'il y ait une réaction, il faut d'abord que les espèces réactives (combustible et oxydant) soient en contact et que l'énergie nécessaire à l'activation de la réaction soit apportée. La flamme (zone de réaction) est donc le résultat du transport des espèces, du transport de la chaleur et de la réaction chimique.

Dans un écoulement laminaire, compte tenu des différents mécanismes qui permettent l'existence d'un écoulement réactif, il est usuel de distinguer deux types différents de flammes [7] :

- les flammes laminares de diffusion (conséquences de combustion non prémélangée) ;
- les flammes laminares de prémélange.

Flammes Laminares de Diffusion

Dans ce type de flammes, les réactions chimiques sont très rapides comparées aux phénomènes de convection et la combustion est contrôlée par la diffusion des espèces et de la chaleur. Les réactifs et la chaleur diffusent les uns vers les autres - c'est ce qui va prendre le plus de temps - avant de pouvoir réagir.

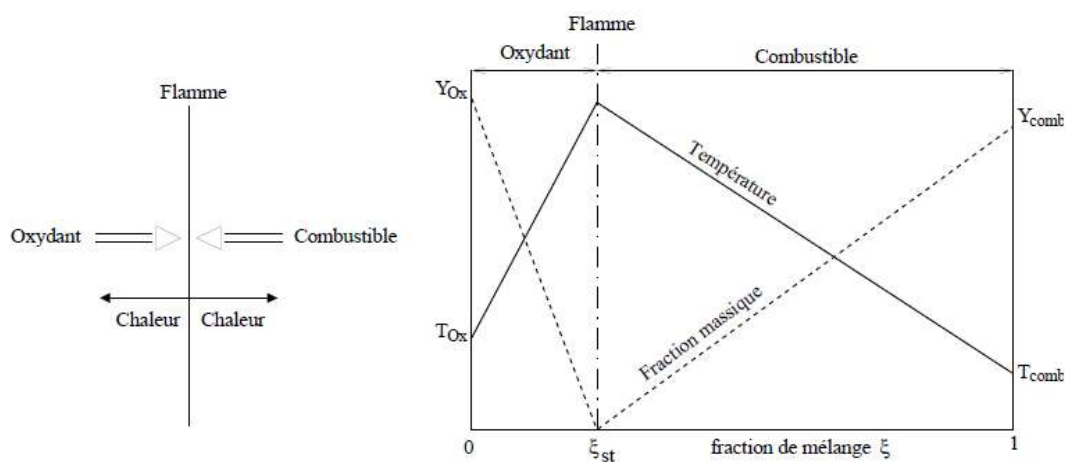


Figure 2.1 Structure d'une flamme de diffusion laminaire

Si on considère une seule réaction globale Eq. (1.2) et le cas limite d'un temps chimique infiniment court devant le temps de mélange des espèces, la flamme doit être considérée comme une surface infiniment fine dans l'écoulement. Cette interface sépare le carburant du comburant, qui ne peuvent pas coexister. En utilisant ces approximations, introduites par Burke et Schumann, on peut définir une variable unique qui permet de caractériser l'état thermochimique du mélange : la fraction de mélange ξ . Cette quantité est un scalaire passif défini de telle façon que sa valeur est nulle dans le comburant pur et égale à l'unité dans le carburant pur. La flamme se positionne alors sur l'iso-surface $\xi = \xi_{st}$, où ξ_{st} est la fraction de mélange correspondant à la stœchiométrie.

La structure d'une flamme de diffusion est schématisée sur la figure 2.1. La fraction massique d'oxydant est maximale dans l'oxydant pur et diminue car l'oxydant se mélange aux produits de combustion. Il n'y a plus d'oxydant au niveau de la flamme car la réaction chimique l'a intégralement consommé. L'évolution est la même pour le combustible. La température de flamme T_f est celle des produits de combustion à l'état d'équilibre. Ce type de flammes, qui est donc plus facile à maîtriser, a le désavantage de former plus de polluants, du fait des hautes températures atteintes dans le front de flamme.

Flammes Laminaires de Prémélange

Lorsqu'on allume un mélange gazeux où le combustible et l'oxydant sont initialement mélangés, un front de flamme, séparant les gaz frais des gaz brûlés, se propage dans tout l'espace à une certaine vitesse. Si les gaz réactifs sont initialement placés dans un tube et qu'on allume le mélange à une extrémité du tube, un certain temps après l'inflammation, une flamme plane se propage à vitesse constante perpendiculairement à l'axe du tube.

En réalité, la flamme ne peut pas être exactement plane compte tenu de la présence des parois. De fait, la flamme a une épaisseur finie δ_L et sa vitesse S_L est une caractéristique intrinsèque du mélange et des conditions de pression et de température. La propagation de la flamme est le résultat de l'action de deux phénomènes : tout d'abord les gaz brûlés chauffent par conduction thermique les gaz frais, puis lorsque la température de ces gaz frais est suffisamment élevée ils réagissent en dégageant à leur tour de la chaleur ; cette chaleur va servir à chauffer les gaz frais plus en aval et ainsi de suite. Si l'on considère que les espèces et la température diffusent de la même manière et que les processus sont adiabatiques, la flamme peut être représentée par l'évolution d'une seule variable. Cette variable représente à la fois l'avancement de la réaction chimique et la température ; on choisit en général une variable d'avancement notée c qui est nulle dans les gaz frais et égale à l'unité dans les gaz brûlés, assimilable à la fraction massique des gaz brûlés ou à la température réduite. Dans le cas simple d'une seule réaction globale, Eq.(1.2), on peut directement utiliser la fraction massique de combustible pour caractériser intégralement la composition du mélange.

La structure de la flamme plane laminaire de prémélange dans un repère lié à la flamme est donnée par la figure 2.2.

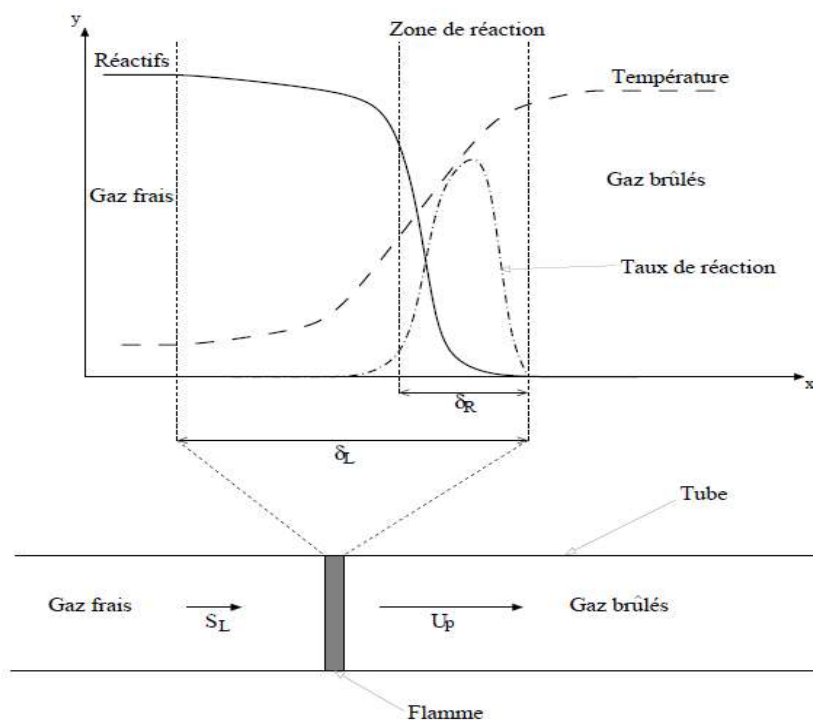


Figure 2.2 Structure du front de flamme de prémélange laminaire

Dans l'épaisseur de la flamme δ_L , la température des gaz frais augmente par conduction de la chaleur et la concentration des réactifs diminue par diffusion moléculaire des gaz brûlés ; les réactions chimiques se produisent uniquement dans une seconde zone d'épaisseur δ_R encore plus fine que la première. On peut démontrer théoriquement cette structure de flamme laminaire de prémélange lorsque les énergies d'activation sont importantes (théorie asymptotique à grande énergie d'activation). Dans ce cas le taux de consommation du combustible exprimé par la loi d'Arrhenius devient négligeable partout (car le facteur exponentiel tend vers zéro) sauf dans une zone de très faible épaisseur δ_R où se concentrent les réactions chimiques. Le rapport entre l'épaisseur de cette zone réactive et l'épaisseur de flamme δ_L est inversement proportionnel à l'énergie d'activation.

Le dégagement de chaleur engendré par les réactions chimiques a une conséquence autre que celle de la propagation de la flamme. En effet, dans le cas d'un écoulement à petit nombre de Mach dans lequel on peut considérer la pression comme thermodynamiquement constante, l'augmentation de la température s'accompagne d'une diminution de la masse volumique des gaz suivant : $\rho T \approx \text{cte}$. La conservation de la masse à la traversée de la flamme conduit ainsi à une accélération des gaz brûlés ($U_P > S_L$) par rapport aux gaz frais :

$$\rho_r S_L = \rho_P U_P$$

ρ_r et ρ_P sont respectivement les masses volumiques dans les gaz frais et dans les gaz brûlés. S_L est la vitesse des gaz frais par rapport à la flamme (ou de la flamme par rapport aux gaz frais), U_P est la vitesse des gaz brûlés par rapport à la flamme.

Le mode de combustion qui donne ce type de flammes est souvent utilisé en régime pauvre (le carburant est en quantité inférieure aux conditions stœchiométriques), permettant ainsi d'augmenter le rendement du système de combustion et de réduire la production d'oxydes d'azote, polluant très nocif dont on veut limiter la production. En contrepartie, les flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser, nécessitant l'utilisation de dispositifs complexes d'accrochage de flamme. De même, la question du stockage d'un mélange air/carburant dans la gamme de flammabilité est prépondérante et n'est pas envisageable dans un contexte industriel.

Pour résumer, une flamme de diffusion sépare le combustible de l'oxydant alors qu'une flamme de prémélange sépare les gaz frais des gaz brûlés. Ces deux types de flammes ne sont que des cas limites, des flammes correspondant à un type intermédiaire sont possibles. Il existe, par exemple, des structures de flammes qui peuvent à la fois présenter une structure de prémélange et de diffusion, on parle alors de flammes triples ; elles jouent un rôle important dans le processus de stabilisation des flammes non prémélangées.

2.2.2.4 L'effet du swirl sur un écoulement réactif

Le swirl est couramment utilisé en combustion car il a un rôle stabilisateur pour la flamme. En effet, si l'intensité du swirl est suffisamment forte, une zone de recirculation va apparaître. Cette zone de recirculation est une région dans laquelle les gaz frais et les gaz brûlés sont bien mélangés [9].

Elle constitue alors une zone de stockage de chaleur et d'espèces réactives en proche sortie du brûleur, si tant que l'intensité du swirl soit suffisamment importante. De plus, le swirl améliore l'entraînement et donc la taille de la flamme est réduite. Aussi, le fait de recourir au swirl permet, d'une part de travailler avec des vitesses de carburant plus élevées pour des flammes de diffusion et d'autre part de réduire la taille de la chambre de combustion en combustion prémélangée.

L'effet du swirl sur l'aérodynamique de l'écoulement est important et varie suivant son intensité, il en va de même en combustion. A chaque réponse de l'écoulement au swirl correspond un type de flamme, comme le montre la figure suivante :

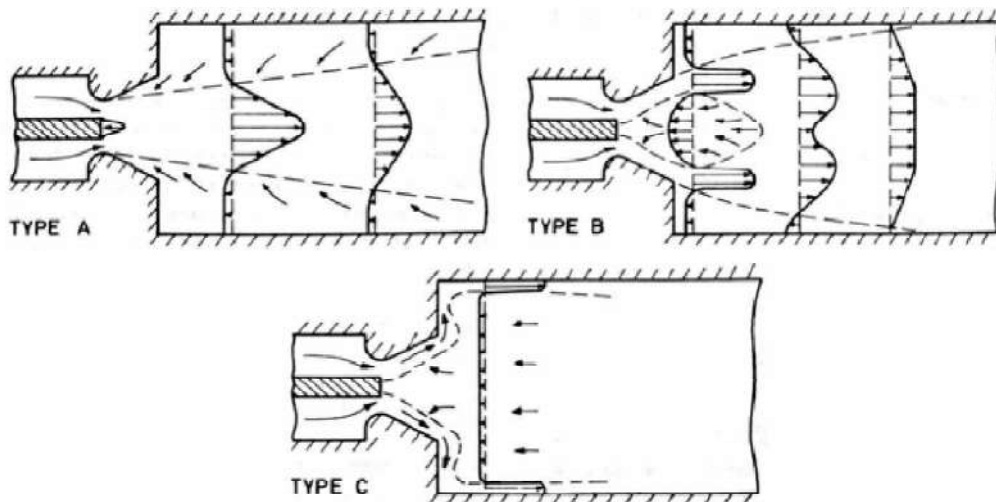


Figure 2.3 Différents types de jets et flammes swirlés [9]

- Flamme de type A : l'intensité du swirl est faible. Le comportement de la flamme est analogue à celui rencontré sans swirl. Le front de flamme se situe à une certaine distance du brûleur.
- Flamme de type B : l'intensité du swirl est modérée à élevée, apparition de la zone de recirculation et la flamme se stabilise plus près du nez du brûleur. C'est le type de combustion recherché en général car elle est ici très intense du fait de l'existence d'une zone très turbulente et très riche en gaz frais.
- Flamme de type C : les interactions flamme/parois sont intenses. Cette situation est généralement indésirable, excepté dans le cas de certains fours.

Concernant la combustion en diffusion (dans le cas d'une injection centrale du fuel et d'une injection annulaire externe d'oxydant), et imaginant que les oxydants soient suffisamment swirlés pour induire une zone de recirculation, Leuckel et Fricker mettent en évidence deux types de flamme :

- la vitesse du fuel est suffisamment importante pour traverser toute la zone, seule une petite partie du fuel brûle au passage dans la zone de recirculation et sert alors dans la flamme pilote pour l'installation : le fuel restant est préchauffé. La flamme est donc intense et longue.
- la vitesse du fuel n'est pas suffisante, celui-ci se répand radialement. Le mélange est rapide et la flamme devient courte et bleue.

Par ailleurs, la littérature montre que l'utilisation du swirl dans un brûleur à jets séparés (diffusion) peut conduire à une réduction des émissions de polluants et notamment celle des oxydes d'azote (NOx) dits "thermiques".

En effet, sous l'effet du swirl et donc de l'amélioration du mélange des réactifs, la température de la flamme diminue. Ou c'est cette même température qui sert de catalyseur à la formation de NOx. Donc diminuer la température de la flamme conduit à la baisse de production des NOx. De plus, lorsque l'intensité du swirl est suffisante, augmenter le nombre de swirl revient à diminuer le temps de séjour dans les zones chaudes du fait des fortes vitesses dans la zone de recirculation. Ceci a également pour effet de limiter la production de NOx. Ces résultats conduisent naturellement à penser que l'on a intérêt à swirler le plus possible l'écoulement. Cependant, du point de vue industriel, cela s'accompagne des inconvénients importants : l'augmentation du swirl (en changeant l'angle des ailettes par exemple) conduit à augmenter considérablement les pertes de charge au passage dans le swirleur (ce qui est très préjudiciable, spécialement pour les turbines à gaz). Par ailleurs, l'augmentation du swirl conduit également à rapprocher la flamme de la zone de l'injecteur et donc favorise la remontée de la flamme ("flash-back") ou du moins son accrochage sur les lèvres de l'injecteur. Les risques d'endommagement de l'installation sont donc très présents dans ce cas de figure. Aussi, il est nécessaire de trouver une intensité du swirl qui réalise un compromis entre d'une part la réduction d'émission de polluants, et d'autre part la distance de la flamme à l'injecteur. On voit ainsi toute l'importance du swirl tant du point de vue de l'aérodynamique de l'écoulement que de celui du rendement de la combustion et de l'environnement [9].

2.3 Applications industrielles de la combustion turbulente

- Dans le cas des **turbines aéronautiques**, le carburant est, la plupart du temps, injecté sous forme liquide (spray). Ceci mène inévitablement à un mode de combustion de type prémélange partiel. L'utilisation de jets de dilution peut aussi mener à des flammes non prémélangées.
- Dans le cas des **turbines de production d'énergie**, la combustion est souvent prémélangée. A ce titre, de faibles hétérogénéités de mélange peuvent influencer fortement la performance des turbines, mettant en lumière l'importance d'un bon prémélange.
- Dans le cas des **moteurs à combustion interne** de type "Diesel", le combustible est souvent injecté sous forme de spray, menant à des régimes de combustion de type prémélange partiel ou combustion stratifiée. A l'inverse, dans le cas des moteurs de type HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), le mélange air-carburant est mélangé de la manière la plus homogène possible (comme dans les moteurs à essence) et est comprimé assez fortement pour atteindre le point d'auto-allumage. De simples hétérogénéités de mélange influencent alors très fortement les performances du moteur. [8]

2.4 La simulation numérique de la combustion turbulente

Pendant de nombreuses années, les études expérimentales ont servi à développer et valider les méthodes de simulation numérique. De nos jours, la simulation numérique est

devenue suffisamment développée pour être utilisé en parallèle des essais expérimentaux, et devient ainsi un outil prédictif.

Mais la simulation numérique n'apporte pas toujours les réponses aux problèmes des constructeurs. Lorsqu'on s'intéresse aux écoulements turbulents et réactifs dont la complexité mène aux instabilités qui ont été évoquées, il faut considérer un large spectre d'échelles à la fois en espace et en temps et autoriser de nombreux phénomènes physiques.

Il existe trois principales approches de résolution numérique des phénomènes physiques [8].

2.4.1 RANS

Historiquement la plus ancienne, la résolution des équations moyennées (RANS pour Reynolds Average Navier-Stokes) se contente de décrire le comportement moyen de l'écoulement mais nécessite la modélisation de tous les effets instationnaires. Bien adaptée au dimensionnement des moteurs, elle a toujours été en peine lorsqu'il a été question d'aborder les instabilités de combustion.

2.4.2 DNS

Au contraire, la simulation numérique directe (DNS pour Direct Numerical Simulation) consiste à calculer toutes les structures de l'écoulement sans modélisation autre que le choix d'un schéma cinétique et la description du transport moléculaire. Malheureusement, cette approche est numériquement extrêmement coûteuse (la qualité des résultats ne doit pas être oblitérée par la diffusion numérique du code de calcul) et limitée à de faibles nombres de Reynolds (qui contrôlent la gamme des tailles de structures présentes dans l'écoulement). Cette approche est donc restreinte à des situations académiques simples, malgré la puissance des machines de calcul disponibles aujourd'hui, mais constitue un outil irremplaçable pour étudier précisément certains phénomènes fondamentaux et aider au développement de modèles. Il est hors de question de simuler un foyer aéronautique ou industriel avec une telle méthode.

2.4.3 LES

Relativement récente, la simulation aux grandes échelles (LES pour Large Eddy Simulation) apparaît comme intermédiaire entre la RANS et la DNS. Il s'agit cette fois de calculer complètement les plus grandes structures turbulentes présentes dans l'écoulement comme en DNS tandis que seul l'effet des plus petites structures est modélisé comme en RANS. Nettement plus coûteuse que la RANS (il faut calculer un écoulement instationnaire, tri-dimensionnel, et renoncer aux simplifications usuelles de la RANS telles que la symétrie, la bidimensionnalité, etc.), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe et donne accès à une précision jamais égalée avec la RANS.

L'échelle de coupure est en principe choisie dans la zone inertielle du spectre de turbulence en raison des hypothèses faites pour développer les modèles. L'impact des modèles sur le résultat final est logiquement moindre qu'en RANS. Enfin, il faut surtout retenir que couplée à des études acoustiques, la LES apparaît comme un outil adapté à l'étude des phénomènes d'instabilités de combustion.

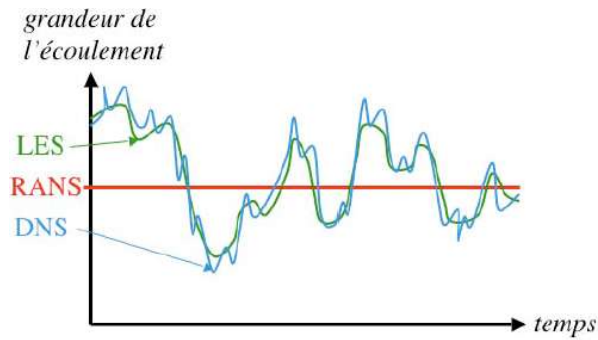


Figure 2.4 Représentation temporelle du degré de détail des différentes méthodes de simulation

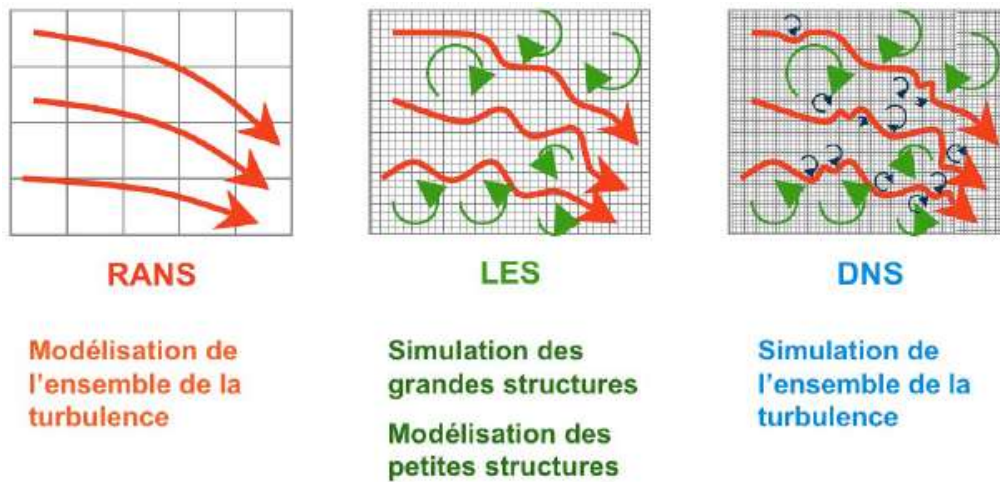


Figure 2.5 Comparaison entre simulation numérique directe (DNS), résolution des équations moyennées (RANS) et simulations aux grandes échelles (LES).

2.5 Formulation mathématique

Equations de l'aérothermochimie turbulente

Les équations mathématiques qui régissent l'aérothermochimie du mélange de combustible dans la flamme, traduisent les bilans de masse, de quantité de mouvement et d'énergie [11]. Il est à noter que le lecteur peut se référer au manuel du code de calcul que l'on utilisera pour une présentation relativement détaillée de la plupart des relations utilisées le long de travail.

2.5.1 Equations de l'aérodynamique

Equation de continuité pour l'espèce m

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \text{div}(\rho_m \vec{u}) = \text{div} \left[\rho D \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c \quad \dots (2.4)$$

ρ_m est la masse volumique de l'espèce m .

ρ est la masse volumique du mélange.

\vec{u} est la vitesse du mélange.

D est la diffusivité massique de l'espèce dans le reste du mélange (*loi de Fick*).

$\dot{\rho}_m^c$ regroupe les termes sources d'origine chimique.

Equation de continuité pour le mélange

L'équation de continuité pour le mélange est déduite en sommant l'équation (2.4) sur toutes les espèces et en tenant compte du fait que la masse est conservée au cours des réactions chimiques.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad \dots (2.5)$$

Equation de conservation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} \vec{u}) = -\frac{1}{a^2} \nabla p - \nabla \left(\frac{2}{3} \rho k \right) + \text{div} \sigma + \rho \vec{g} \quad \dots (2.6)$$

Avec

$$\sigma = \mu [\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T] + \lambda \text{div} \vec{u} Id_3 \quad \dots (2.7)$$

Où :

p est la pression du mélange.

a est une quantité sans dimension utilisée conjointement avec la méthode PGS (*Pressure Gradient Scaling*). Cette dernière permet d'améliorer la précision du calcul dans le cas des écoulements à faible nombre de Mach.

k est l'énergie cinétique turbulente.

σ est le tenseur newtonien des contraintes visqueuses.

λ, μ sont les coefficients de viscosité.

Id_3 représente la matrice identité.

\vec{g} est l'accélération due à la gravité.

Equation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} I) = -p \text{div} \vec{u} + \rho \varepsilon - \text{div} \vec{J} + \dot{Q}^c \quad \dots (2.8)$$

Avec

$$\vec{J} = -K \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla \left(\frac{\rho_m}{\rho} \right) \quad \dots (2.9)$$

Où :

I est l'énergie interne spécifique du mélange.

\vec{J} est le vecteur densité de flux de chaleur dû à la conduction et à la diffusion d'enthalpie (*effet de Duffour*).

ε est le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente.

T est la température du mélange.

K est la conductivité du mélange.

h_m est l'enthalpie spécifique de l'espèce m .

\dot{Q}^c représente l'énergie produite ou consommée par les réactions chimiques.

Equation de transport de l'énergie cinétique turbulente

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{u} k) = -\frac{2}{3} \rho k \text{div} \vec{u} + \sigma : \nabla \vec{u} + \text{div} \left(\frac{\mu}{Pr_k} \nabla k \right) - \rho \varepsilon \quad \dots (2.10)$$

Pr_k : est le nombre de Prandtl associé à l'énergie cinétique turbulente k .

Equation de transport du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \text{div}(\rho\vec{u}\varepsilon) = -\left(\frac{2}{3}C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3}\right)\rho\varepsilon\text{div}\vec{u} + \text{div}\left(\frac{\mu}{Pr_{\varepsilon}}\nabla\varepsilon\right) + \frac{\varepsilon}{k}(C_{\varepsilon 1}\sigma:\nabla\vec{u} - C_{\varepsilon 2}\rho\varepsilon) \quad \dots (2.11)$$

Pr_{ε} : est le nombre de Prandtl associé au taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente ε .

$C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, C_{\varepsilon 3}, P_{rk}$ et Pr_{ε} : sont les constantes usuelles du modèle de turbulence k - ε standard, données comme suite :

$$\begin{aligned} C_{\varepsilon 1} &= 1.44 & P_{rk} &= 1.0 \\ C_{\varepsilon 2} &= 1.92 & Pr_{\varepsilon} &= 1.3 \\ C_{\varepsilon 3} &= -1.0 & C_s &= 1.5 \end{aligned}$$

Les coefficients de transport sont donnés par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \mu = \mu_{air} + \rho C_{\mu} \frac{k^2}{\varepsilon} \\ \lambda = A_3 \mu \\ K = \frac{\mu C_p}{Pr} \\ D = \frac{\mu}{\rho Sc} \end{array} \right. \quad \dots (2.12)$$

Avec :

C_{μ} est une constante empirique qui a une valeur standard égale à 0.09.

μ_{air} est donnée par la formule de Sutherland :

$$\mu_{air} = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2} \quad \dots (2.13)$$

Où A_1 et A_2 sont des constantes valant respectivement 1.457×10^{-5} et 110, **Yang (2000)** et la constante A_3 est prise égale à $(-2/3)$.

Les nombres de Prandtl et Schmidt (Pr et Sc) sont des constantes données.

2.5.2 Equations d'état

On suppose que le fluide est un mélange homogène de gaz parfaits. Ainsi, on peut écrire les relations suivantes :

$$p = R_0 T \sum_m \frac{\rho_m}{W_m} \quad \dots (2.14)$$

$$I = I(T) = \sum_m \frac{\rho_m}{\rho} I_m(T) \quad \dots (2.15)$$

$$C_p = C_p(T) = \sum_m \frac{\rho_m}{\rho} C_{pm}(T) \quad \dots (2.16)$$

$$h_m = h_m(T) = I_m(T) + R_0 \frac{T}{W_m} \quad \dots (2.17)$$

Où

R_0 est la constante universelle des gaz parfaits.

W_m est la masse molaire de l'espèce m .

I_m est l'énergie interne de l'espèce m .

C_p est la chaleur spécifique du mélange à pression constante.

C_{pm} est la chaleur spécifique de l'espèce m à pression constante.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre on a pu prendre une idée générale concernant la combustion et ses différents modes, les types de flammes, et quelques domaines d'application.

Aussi on a vu quelques méthodes numériques qui peuvent utiliser pour simuler l'interaction entre un processus chimique de combustion et la turbulence.