

Chapitre 3 : Formulation mathématique et résolution numérique

3.1 Introduction

Dans notre étude, l'investigation numériques réalisées sur un tube à flamme ont porté essentiellement et dans leur globalité sur la compréhension des phénomènes aérothermochimiques fondamentaux de base. Cet outil a permis la constitution d'une excellente banque de donnée sur les flammes non prémélangées, d'une grande importance quant à la maîtrise des processus physiques et chimiques prépondérants au sein des systèmes de combustion. L'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques et le comportement dynamique des flammes représentent l'intérêt majeur rencontré dans la quasi-totalité des applications de la combustion non prémélangée.

Les calculs numériques ont été menés à l'aide du code de calcul "Fluent" Version 6.3, qui utilise la méthode des volumes finis. Nous présentons les détails de la méthodologie de résolution du problème avec ce code dont l'utilisation nous a pris énormément de temps.

3.2 Méthode des volumes finis

Le logiciel " Fluent " utilise la méthode des volumes finis. La discrétisation des équations intégrales qui gouvernent l'écoulement, tels que les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie associées à l'autres scalaires dépendants de la nature de l'écoulement est faite en se basant sur la technique de la méthode des volumes finis, elle consiste en :

- La division du domaine de calcul en des volumes de contrôle discret par un maillage de calcul.
- L'intégration des équations gouvernantes sur les volumes de contrôle individuels, afin de construire les équations algébriques pour les variables dépendantes discrètes (les inconnus), tels que les vitesses, pressions, températures et les autres scalaires conservés.
- La linéarisation des équations discrétisées et la solution du système d'équations linéaires résultants pour pouvoir adapter les valeurs des variables dépendantes.

3.3 Présentation du code " Fluent "

" Fluent " est un code de calcul qui permet de simuler les écoulements des fluides avec et sans transfert thermiques dans des géométries complexes. Il peut résoudre des problèmes d'écoulement avec des mailles structurées et non structurées, quel que soit la complexité de la géométrie, avec une facilité relative. Les mailles supportées en 2D sont de types triangulaires ou quadrilatérales, elles sont tétraédriques, hexaédriques ou pyramidales en 3D, ou des mailles (hybrides) mélangées.

Le code " Fluent " est écrit en langage C et utilise pleinement la flexibilité et la puissance offertes par ce langage (allocation de l'espace mémoire dynamique). En outre, il utilise une architecture qui lui permet de s'exécuter autant que plusieurs processus simultanés sur un seul PC de travail ou sur des machines en parallèles, pour une exécution plus efficace.

" Fluent " facilite à l'utilisateur sa manipulation à travers la simplicité de son interface graphique. Le code n'est limité uniquement par ces propres fonctions, mais il offre à l'utilisateur la possibilité d'y injecter sa propre fonction et définir toutes particularités de son problème. L'utilisateur avancé peut adapter ou augmenter aux besoins l'interface en programmant en langage C ou C++ ces propres macros et fonctions de menu, afin d'automatiser certaines procédures (ex. de condition aux limite, périodique ou autres) par le moyen des UDF (User Defined Functions) sous forme de programme écrits en langage C, qui va être compilé par le compilateur intégré du code "Fluent ", pour être exécuter après.

3.4 Formulation Mathématique

Les équations gouvernantes notre problème (écoulement compressible turbulent) sont les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie [10].

Equation de continuité
$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad \dots (3.1)$$

Equation de conservation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}) \quad \dots (3.2)$$

Equation de conservation d'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \alpha \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \widetilde{u_j'' h''} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_r) + \bar{S}_{hc} \quad \dots (3.3)$$

La barre (au dessus des symboles) indique la moyenne de Reynolds, et le tilde indique la moyenne de Favre

ρ	la masse volumique	
u	la vitesse	
p	la pression	
h	l'enthalpie, calculé d'après la formule suivante	$h = \sum_s Y_s \int C_{p,s} dT \quad \dots (3.4)$
T	la température	
Y_s	la fraction massique de l'espèce s	
$C_{p,s}$	la capacité calorifique de l'espèces s dans le mélange	
α	la diffusivité thermique	
q_r	représente la perte de chaleur radiative	
S_{hc}	représente le terme source due à la combustion	
$C_{p,s}$	calculer d'après une fonction de température à partir des coefficients fixes existent dans les tables thermochimique de NIST-JANAF.	

La diffusivité thermique modelé comme suite :

$$\bar{\rho} \alpha = \mu \frac{C_v}{C_{pBar}} \left(1.32 + 1.77 \frac{R}{C_v} \right) \quad \dots (3.5)$$

μ la viscosité moléculaire (calculé d'après la loi de Sutherland)

R la constante du gaz
 C_v la capacité calorifique à volume constante
 C_{pBar} la chaleur spécifique moyenne

$$C_{pBar} = \frac{\Delta h}{\Delta T} \quad \dots (3.6)$$

Où $\Delta T = \tilde{T} - T_{ref}$
 $\Delta h = \tilde{h}(T) - \tilde{h}(T_{ref})$

\bar{S}_{hc} défini par la formule suivante :

$$\bar{S}_{hc} = - \sum_{s=1}^N \frac{\bar{\omega}_s}{M_s} h_{f,s}^\theta \quad \dots (3.7)$$

$h_{f,s}^\theta$ l'enthalpie de formation des espèces
 M_s la masse moléculaire des espèces
 ω_s taux de réaction des espèces

Le flux turbulent $\widetilde{u_j'' h''}$ est le dérivé accord l'hypothèse de gradient

$$- \bar{\rho} \widetilde{u_j'' h''} \approx \frac{\mu_t}{P_{rt}} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \quad \dots (3.8)$$

Où

μ_t la viscosité turbulente
 P_{rt} nombre de Prandtl turbulent

Pour un mélange de N_s espèces (où $s = 1, \dots, N_s$), l'équation de transport pour la fraction massique moyenne d'un seul espèce Y_s peut définir comme suite :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_s \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\bar{\rho} D_{m,s} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_s}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_s \quad s = 1, \dots, N_s \quad \dots (3.9)$$

$D_{m,s}$ coefficient de diffusion massique pour l'espèce s dans le mélange
 Sc_t nombre de Schmidt turbulent ($Sc_t = \mu_t / \rho D_t$, où D_t est la diffusivité turbulente).

La température reliée à la mass volumique et la pression d'après la loi des gaz parfaits.
 Le tenseur de contraintes pour un fluide Newtonien exprimé par

$$\bar{\tau}_{i,j} = \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \quad \dots (3.10)$$

Les contraintes de Reynolds modelé comme suite

$$\widetilde{u_i'' u_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \delta_{ij} \quad \dots (3.11)$$

Le modèle $k - \varepsilon$ standard basé sur l'énergie cinétique turbulente (\tilde{k}) et le taux de dissipation ($\tilde{\varepsilon}$)

La viscosité turbulente défini ici par $\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad \dots (3.12)$

La forme de l'équation de transport devient

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{k}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_j}\right) + G - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \quad \dots (3.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_j}\right) + C_{\varepsilon 1}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}G - C_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad \dots (3.14)$$

μ la viscosité moléculaire

Le taux de production de l'énergie cinétique turbulente G donné par

$$G = -\bar{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad \dots (3.15)$$

Les valeurs standards sont utilisées on mode constants $C_\mu, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, \sigma_k$, et σ_ε .

Le modèle $k - \varepsilon$

Parmi les modèles de turbulence, le modèle $k - \varepsilon$. Il est l'un des modèles les plus utilisés. Ce modèle du premier ordre repose sur le concept de viscosité turbulente introduit par Boussinesq, qui consiste à modéliser les tensions de Reynolds $\overline{\rho u_i'' u_k''}$ par analogie avec le tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\tau}_{ik}$ [7]. En faisant l'hypothèse que ces deux termes représentent des phénomènes de diffusion, l'un correspond à la diffusion moléculaire et l'autre à un processus de mélange par diffusion turbulente. Par analogie avec le transport moléculaire de quantité de mouvement qui est caractérisé par la viscosité du fluide ν , le mélange turbulent est caractérisé par la viscosité turbulente ν_T . Le premier est une propriété moléculaire du fluide alors que le second dépend de l'écoulement turbulent, ν_T est donc *a priori* une variable du temps et de l'espace. Les tensions de Reynolds sont alors exprimées en fonction des gradients moyens de la façon suivante :

$$\overline{\rho u_i'' u_k''} - \frac{1}{3}\overline{\rho u_l'' u_l''}\delta_{ik} = -\bar{\rho}\nu_T\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i}\right) + \frac{2}{3}\bar{\rho}\nu_T\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l}\delta_{ik} \quad \dots (3.16)$$

Le modèle $k - \varepsilon$ utilise aussi une équation de transport pour le taux de dissipation de la turbulence ε et la connaissance de k et ε permet d'exprimer la viscosité turbulente ν_T . L'analyse dimensionnelle a conduit à :

$$\text{La viscosité turbulente défini par} \quad \nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad \dots (3.17)$$

Où C_μ est une constante déterminée expérimentalement dont la valeur est estimée à 0.09.

La connaissance de k et ε permet de calculer la viscosité turbulente et finalement les tensions de Reynolds et les flux turbulents des scalaires.

Le modèle $k - \varepsilon$ est limité à des cas où la turbulence est faiblement anisotrope car ce modèle ne résout pas les différentes composantes de l'énergie cinétique [7].

De plus, l'hypothèse de Boussinesq, qui conduit à la loi gradient pour les flux turbulents, peut se révéler inadéquate pour des écoulements à masse volumique variable. En effet, le transport turbulent peut, dans certaines configurations de combustion, être complètement dé-corrélée des gradients moyens, voire même être de signe opposé à celui donné par la loi gradient.

3.5 La configuration du problème

Dans notre travail on a créé la configuration à l'aide du logiciel SOLIDWORKS pour gagner le temps et pour obtenir une bonne géométrie, puis on a l'exporte vers le générateur de maillage " GAMBIT " pour faire la discrétisation.

La configuration qu'on a étudiée pour comprendre quelques caractéristiques des écoulements réactifs turbulents, c'est un modèle de tube à flamme d'une chambre de combustion d'un turboréacteur, comme il est indiqué sur la figure 3.1.

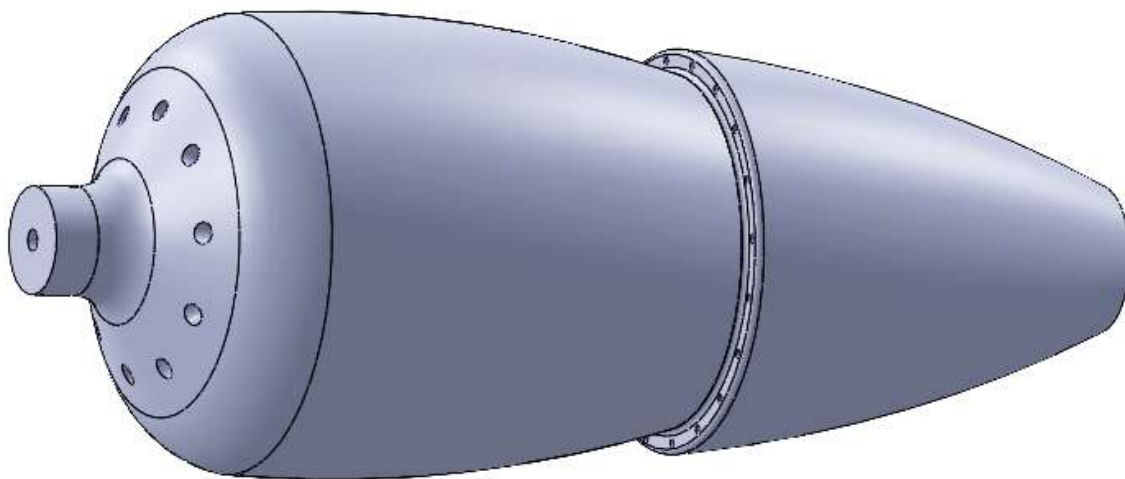


Figure 3.1 Modèle d'un tube à flamme

3.6 Le préprocesseur Gambit

C'est un pré processeur intégré pour l'analyse en CFD, il est utilisé pour construire une géométrie et générer son maillage (structuré ou non structuré, en coordonnées cartésiennes, polaires, cylindriques ou axisymétriques), il peut réaliser des éléments de maillages complexes en deux ou trois dimensions avec des types rectangulaire ou triangulaire.

Les options de génération de maillage en Gambit proposent une flexibilité de choix. On peut décomposer la géométrie en plusieurs parties pour générer un maillage convenable selon les besoins, sinon Gambit génère automatiquement un maillage adapté au type de géométrie construite.

Les défauts sont détectés à l'aide de son interface comportant plusieurs fenêtres d'outils de création, génération, vérification du maillage du modèle étudié et l'incorporation des conditions aux limites.

3.6.1 Maillages

Quand la géométrie est régulière, le choix du maillage est simple. Les lignes du maillage suivent souvent les directions des coordonnées. Pour les géométries complexes, le choix n'est pas tout à fait simple. Le maillage est souvent sujet de contraintes imposées par la méthode de discrétisation.

Si l'algorithme est désigné pour un maillage curviligne et orthogonal, le maillage non orthogonal ne peut pas être utilisé. Si les volumes de contrôles sont exigés pour être quadratiques ou hexaédriques, les mailles constituées par des triangles ou tétraèdres ne peuvent pas être utilisés ...etc. quand la géométrie est complexe et les contraintes ne peuvent pas être accomplies nous rencontrerons bien sûr des compromis.

Les maillages non orthogonaux adaptés sont le plus souvent utilisés pour les calculs des écoulements à géométries complexes (la plus parts des codes commerciaux utilisent ce genre de maillage). Ils peuvent être structurés ou non structurés, leur avantage c'est qu'ils peuvent s'adapter n'importe quelle géométrie, et que l'on peut mieux atteindre les propriétés optimales que les maillages curvilignes orthogonaux.

Les maillages non orthogonaux ont aussi de sérieux inconvénients, les équations transformées contiennent plus de termes, ce qui augmente d'une part la difficulté de programmer et d'autre part le coût de résolution des équations. Le non orthogonalité du maillage peut engendrer des solutions non physiques et irréelles et l'arrangement des variables sur ce maillage affecte la fiabilité et l'efficacité de l'algorithme.

Construction du maillage sous GAMBIT

La première étape dans le processus de génération du maillage consiste à importer la configuration dont on souhaite faire la simulation.

Le maillage employé pour réaliser la simulation de l'écoulement réactif est présenté sur les figures 3.2 et 3.3.

Le maillage doit être suffisamment fin, afin de pouvoir capter les grandes structures turbulentes et les autres caractéristiques de l'écoulement. La sortie de la chambre est aussi maillée très finement, car il s'agit de la zone d'intérêt de ce calcul.

On fait, après, un maillage petit pour les zones importantes, et grand pour les zones moins d'importance, par l'utilisation de la commande " Boundary layer ", puis on lance le maillage du volume total (la chambre), on utilise des mailles triangulaires non structurés (Tet/Hybrid type TGrid).

Le résultat du maillage est constitué de :

Le nombre de nœuds : 74695

Le nombre d'éléments : 372428

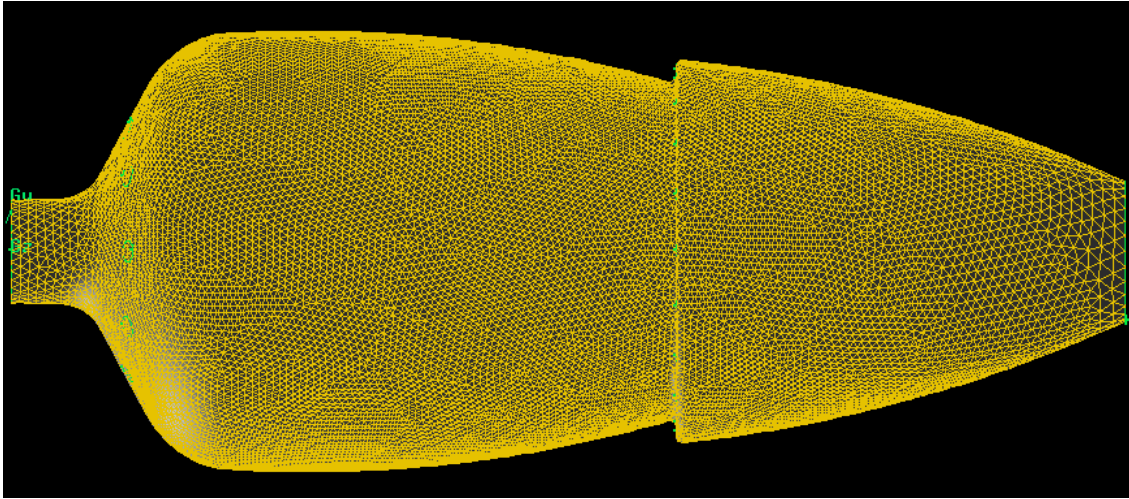


Figure 3.2 Maillage utilisé pour les simulations numériques

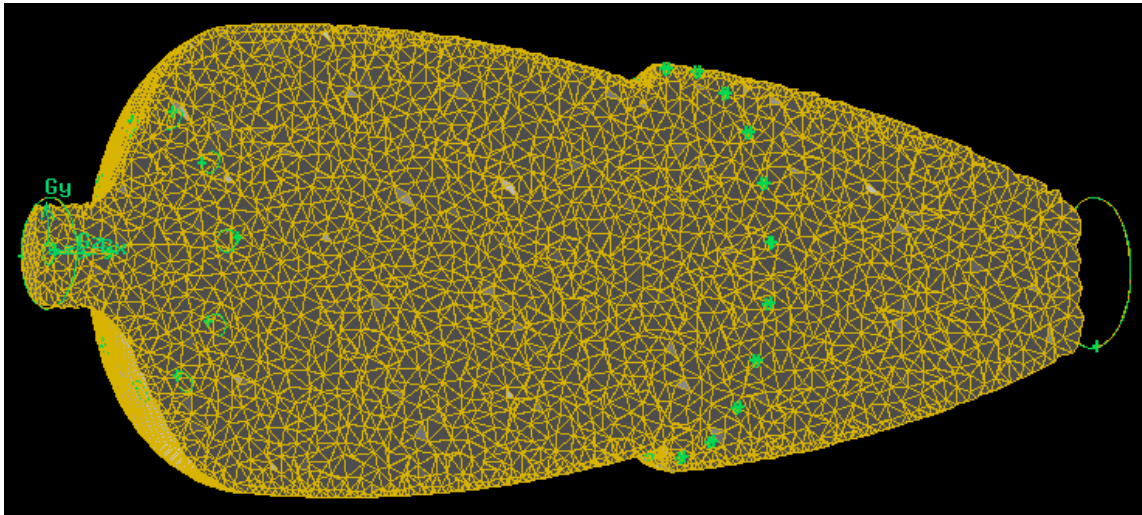


Figure 3.3 Vue en coupe montrant le maillage à l'intérieur de la chambre

3.6.2 Les conditions aux limites

Il faut définir le type des conditions aux limites que l'on souhaite imposer sur les différentes limites du domaine de calcul. On commence par choisir le solveur qui sera utilisé par la suite : Solver/Fluent5/6.

On impose la condition " mass-flow-inlet " sur les parois d'entrées (kérosène, air primaire, air secondaire).

On impose la condition "out flow" sur la paroi de sortie (les gaz brûlés).

GAMBIT s'impose sur le reste des parois par défaut le type "Wall".

Ces différents choix sont récapitulés ci-dessous :

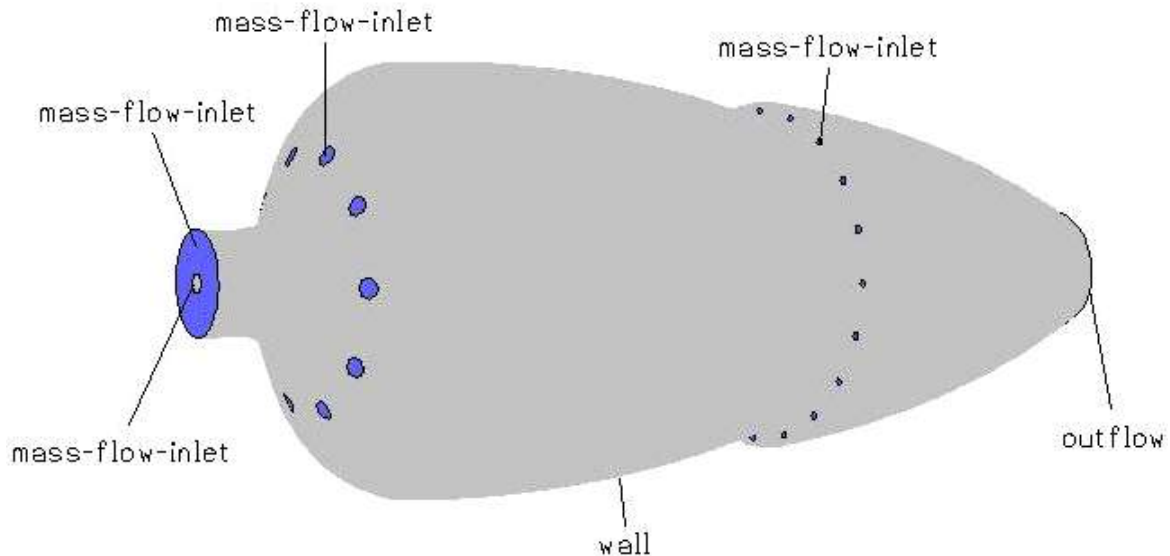


Figure 3.4 Les conditions aux limites

Lorsque le maillage est terminé et les conditions aux limites sont correctement imposées, il ne reste qu'à exporter ce maillage dans un format lisible par le solveur. Ceci se fait par la commande File/Export/Mesh qui permet d'écrire un fichier de maillage avec l'extension .msh.

3.7 Démarche numérique du solveur

La procédure de simulation par le logiciel " Fluent " s'effectue suivant les étapes de l'algorithme ci-dessous, qui décrit les différents paramètres de la solution.

Etape 1 : Choix du solveur

Les possibilités offertes sur " Fluent " pour définir le type du solveur sont : Coupled-Implicit, Coupled-Explicit, ou Segregated-Implicite.

Les ' Coupled solvers ' sont recommandés si une forte interdépendance existe entre la densité, l'énergie, les moments, et/ou les espèces. (ex, écoulement compressible à haute vitesse ou les écoulements réactifs). En général, le solveur 'coupled-implicit' est recommandé par rapport au solveur 'coupled-explicit'. En gros, il est à noter que le temps nécessaire pour le solveur implicite est deux fois plus rapide et il nécessite une capacité mémoire deux fois plus de que celle-ci du 'coupled-explicit' ou 'segregated-implicit'. Il faut noter aussi que, le solveur 'coupled-explicit' doit être utilisé uniquement pour les écoulements instationnaires. Par contre, le solveur 'segregated-implicit' est préférable dans tous les autres cas, car l'approche segregated offre de la flexibilité dans le traitement de la solution et nécessite moins de mémoire que le solveur 'coupled-implicit'.

Etape 2 : Schéma de discrétisation (Méthodes d'interpolation)

Les variables Φ (stockées au centre des cellules) doivent être interpolées aux faces des volumes de contrôle, " Fluent " propose de nombreux schéma d'interpolation :

$$\frac{(\rho\phi)^{t+\Delta t} - (\rho\phi)^t}{\Delta t} \Delta V + \sum_{faces} \rho_f \phi_f V_f A_f = \sum_{faces} \Gamma_f (\nabla\phi)_{\perp,f} A_f + S_\phi \Delta V \dots (3.18)$$

- Schéma « Upwind » du 1^{er} ordre : Facile à converger mais seulement au premier ordre.
- Schéma « Power Law » loi de puissance : Plus précis que le premier ordre quand $Re_{cell} < 5$ (Écoulement de type bas Reynolds).
- Schéma « Upwind » du 2nd ordre : Utilise des plus grands 'stencil' pour une précision au 2^{ème} ordre, essentiel avec tri/tet maillage ou quand l'écoulement n'est pas aligné avec le maillage.
- Schéma « Quadratique Upwind Interpolation » (QUICK): Appliquer avec le maillage quad./hex. et hybrides (pas aux tri.), utile pour les écoulements en rotation et swirlé, précis à l'ordre 3 sur un maillage régulier.
- Schéma « Bounded Central Differencing » : Appliquer au maillage mixte et non uniforme des géométries complexes.

Etape 3 : Méthodes d'interpolation pour la pression

Des options supplémentaires sont disponibles sur le code " Fluent " pour calculer la pression aux faces en utilisant le solveur 'segregated'. Les schémas des méthodes d'interpolation pour les pressions aux faces sont :

- Standard : Schéma par défaut, précision réduite pour les écoulements avec forts gradients de pression normaux à la surface près des frontières.
- Linear : à utiliser quand les autres options ont des difficultés de convergence ou des comportements non-physiques.
- Second-Order: à utiliser pour les écoulements compressibles; ne pas utiliser dans les matériaux poreux, discontinuités, turbines ou méthodes VOF.
- Body Force Weighted : à utiliser quand les forces de gravité sont importantes, (e.g., convection naturelle à Re élevé ou écoulements fortement swirlés).
- PRESTO! : à utiliser avec les écoulements swirlés, les milieux poreux ou les domaines fortement courbés.

Etape 4 : Couplage pression vitesse

Le couplage pression-vitesse se réfère à la manière dont la conservation de la masse est prise en compte quand on utilise le solveur « segregated ». On a trois méthodes possibles :

- SIMPLE : schéma par défaut, robuste.
- SIMPLER : utiliser dans le cas des maillages complexes non uniformes, convergence plus rapide pour les problèmes simples.

- PISO : schéma utile pour les écoulements instationnaires ou pour les schémas contenant des cellules avec des skews plus élevé que la moyenne.

Etape 5 : Initialisation

La procédure d'itération nécessite que toutes les variables soient initialisées avant le démarrage du calcul. Une initialisation 'réaliste' améliore la stabilité et la vitesse de convergence. Dans certain cas, une solution initiale correcte est nécessaire (ex : le champ de température permettant l'initialisation d'une réaction chimique).

Etape 6 : Convergence

L'équation de transport de ϕ se présente simplement :

$$a_p \phi_p + \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} = b_p \quad \dots (3.19)$$

Les coefficients a_p, a_{nb} dépendent de la solution et mis à jour à chaque itération. Au début de chaque itération, l'égalité est fautive. Le décalage est appelé le résidu (R_p), avec :

$$R_p = a_p \phi_p + \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} - b_p ; R = \sum_{cells} |R_p| \quad \dots (3.20)$$

R_p doit devenir négligeable au fur et à mesure des itérations. Les résidus que vous suivez sont sommés sur toutes les cellules:

$$R = \sum_{cells} |R_p| \quad \dots (3.21)$$

Les résidus suivis pour le solveur couplé sont basés sur la rms du taux d'évolution temporelle de la variable conservative.

A la convergence, toutes les équations de conservation discrétisées (momentum, energy, etc.) se conforment dans chaque cellule à une tolérance spécifiée et la solution ne change plus avec le temps.

Etape 7 : Suivi de la Convergence

Le Suivi de la convergence se fait avec les résidus. Le tracé des résidus montre quand ceux-ci atteignent le seuil de tolérance. En général, une décroissance d'un ordre 10^{-3} en magnitude des résidus indique une convergence au moins qualitative et les caractéristiques principales de l'écoulement sont établies. Les résidus de l'énergie doivent atteindre 10^{-6} et des espèces 10^{-5} afin d'obtenir la conservation.

Etape 8 : Stabilité

Des instabilités numériques peuvent apparaître avec un problème mal posé, un mauvais maillage et/ou un mauvais réglage du solveur. Cela est détecté par des résidus qui augmentent ou restent « bloqué », indiquant une divergence des résidus. C'est-à-dire qu'il y a un déséquilibre dans les équations de conservation.

Les solutions possibles pour remédier ce problème sont:

- Vérifier que le problème est bien posé.
- Calculer une première solution avec un schéma à l'ordre 1.
- Diminuer la sous-relaxation pour les équations ayant des problèmes de convergence (segregated).
- Réduire le nombre de Courrant (coupled).
- Remailler ou raffiner le maillage.

Etape 9 : Réglage des facteurs sous-relaxation

Le facteur de sous-relaxation α , est utilisé pour stabiliser le processus itératif du solveur 'segregated'.

$$\phi_p = \phi_{p,old} + \alpha \Delta \phi_p \quad \dots(3.22)$$

Si les moniteurs indiquent que la solution est convergée, mais la solution change toujours on a un déséquilibre de masse ou d'énergie. Il y a une possibilité de réduire le critère de convergence ou désactiver 'Test Convergence'.

Diminuer les facteurs de la relaxation pour les 'momentum' aide à converger. Les réglages appropriés sont connus via les tests et l'expérience, alors calculé jusqu'à ce que la solution converge.

3.8 Les conditions aux limites sur Fluent

En plus d'un maillage adéquat, les conditions aux limites sont très importantes pour obtenir une solution précise avec une convergence rapide. Ce paragraphe présente de façon succincte les conditions aux limites qu'on a utilisées.

Afin de définir un problème avec une solution unique, on doit fournir des informations sur les variables aux frontières du domaine. Spécifier les flux de masse, quantité de mouvement, énergie, ... etc. la définition des conditions aux limites implique :

- Identifier la position des frontières (ex : entrées, parois, symétrie)
- Donner les informations sur ces frontières.

Les données dépendent du type de conditions aux limites et des modèles employés. On doit connaître l'information nécessaire aux frontières et positionner ces frontières où l'information est connue ou peut être correctement approchée.

Les mauvaises conditions aux limites ont toujours un impact sur les résultats.

Le logiciel " Fluent " offre la possibilité de changer le type de conditions aux limites et de régler les données suivant nos besoins (exp : définir par des UDFs) [9].

Les conditions aux limites de notre problème sont définies comme suit :

Condition d'entrée : On a choisi le type débit massique à l'entrée « mass-flow-Inlet » pour toutes les entrées, et on caractérise les informations de chacune comme le montre la figure (3.5) pour l'air primaire.

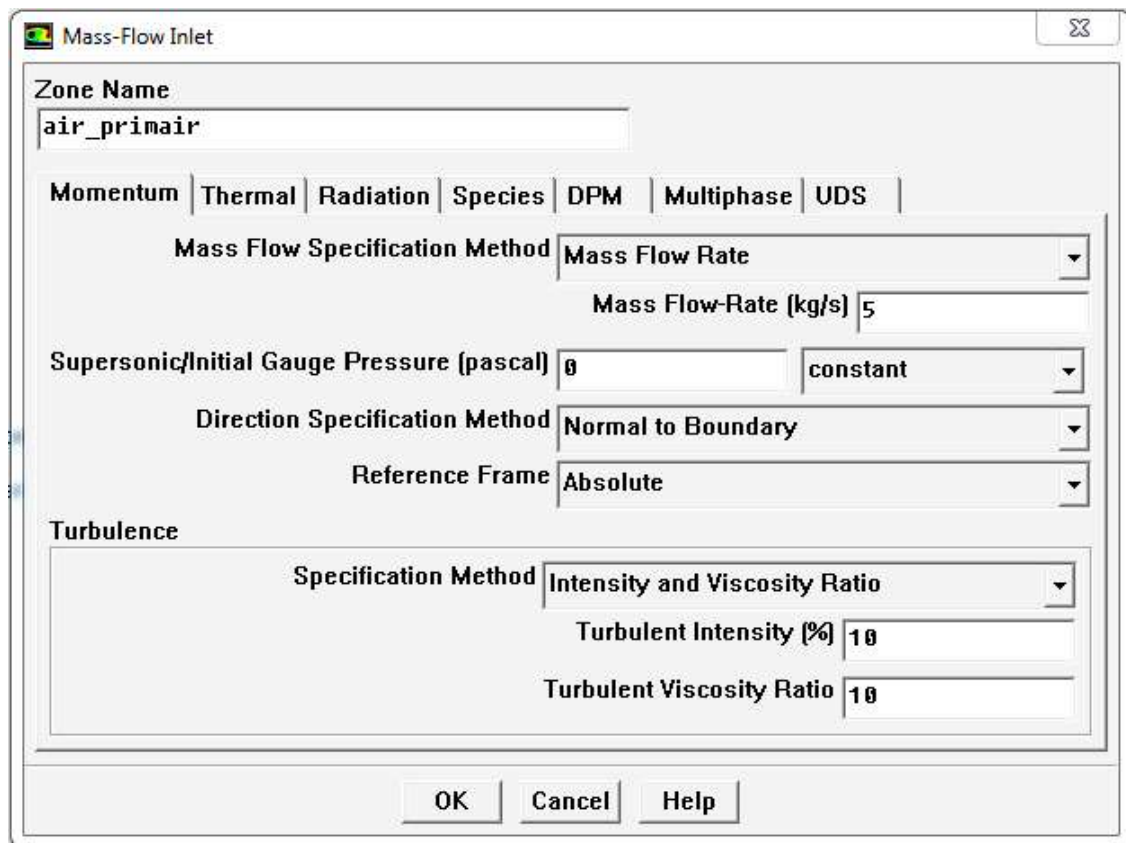


Figure 3.5 Définition des paramètres de débit massique de l'air primaire

Le tableau 3.1 montre les informations qu'on a définies pour chaque entrée.

On introduit pour le kérosène un autre paramètre, voir la figure (3.6).

Les entrées	Mass Flow-Rate (kg/s)	Direction Specification Method	Turbulent Intensity (%)	Turbulent Viscosity Ratio
Air primaire	5	Normal to Boundary	10	10
Air secondaire 1	6	Direction Vector 1 pour X	10	10
Air secondaire 2	4	Normal to Boundary	10	10
Kerosene	0.33	Normal to Boundary	10	10

Tab 3.1 Spécification des variables d'entrée

Condition de sortie : de type flux à la sortie « Outflow ».

Remarque : On a éloignée l'étude de quelques propriétés (ex, la radiation...), et on a considéré la paroi sans épaisseur, pour simplifier les calculs.

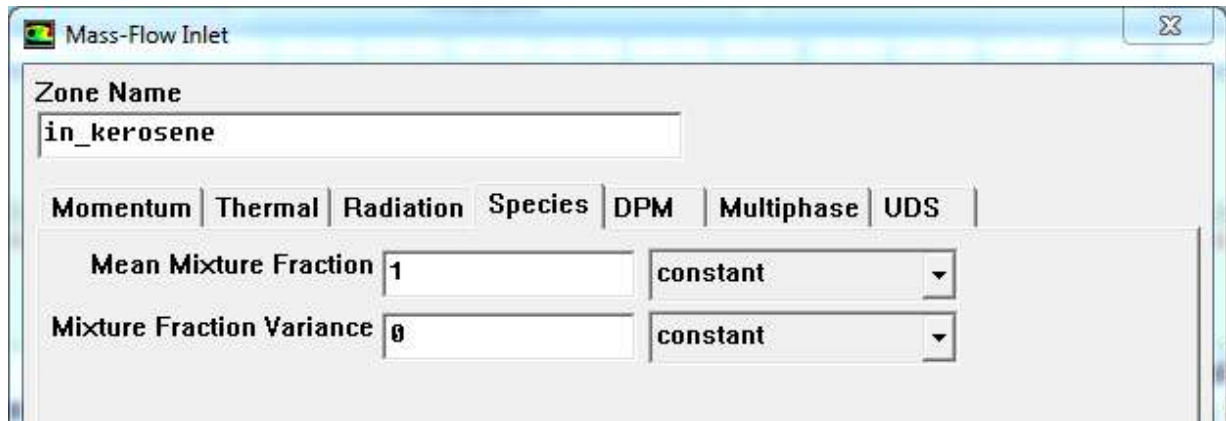


Figure 3.6 Définition de l'espèce combustible

3.9 Génération des calculs par FLUENT

Nous avons suivi pour générer le calcul dans " FLUENT " les étapes suivantes :

1. Chargement de la géométrie par Fluent. File → Read → Case
2. Vérification du maillage. Grid → Check
3. Choisir l'unité de la géométrie. Grid → Scale
4. Définir le Model de solution. Define → Solver
5. Définir le Model de Turbulence. Define → Models → Viscous
6. Définir la Matière. Define → Materials
7. Définir les conditions aux limites. Define → Boundary → Conditions
8. Choix du control de solution. Solve → Controls → Solution
9. Enregistrer les informations liées au problème. File → write → Case &Data
 Le fichier Case (regroupe toutes informations liées à la géométrie).
 Le fichier Data (contient tous les paramètres et données des calculs).
10. Initialiser le calcul. Solve → Initialize → Initialize
11. Vérifier les résidus des calculs. Solve → Monitors → Residual
12. Choisir du nombre des itérations et lancer les calculs. Solve → Iterate
13. Post traitement des résultats. (Display, Plot, Report ...etc)

Remarque : La même démarche peut faire pour le calcul de n'importe quelles configurations, et les étapes précédentes seront répétées.

3.10 Résultats et discussions

Dans cette partie, on présente les résultats de notre étude concernant le comportement des écoulements réactifs dans une chambre de combustion, La distribution des vitesses, de température et des espèces constituant le mélange.

Les figures suivantes montrent les résultats qui nous avons obtenu.

3.10.1 Champ dynamique

■ Champ de vitesse

La figure 3.7 présente les contours des vitesses dans la direction de l'écoulement où il est clair que l'écoulement est fortement accéléré dans la sortie de la chambre.

On remarque une baisse vitesse organisée pour que la flamme soit stabilisée dans le foyer.

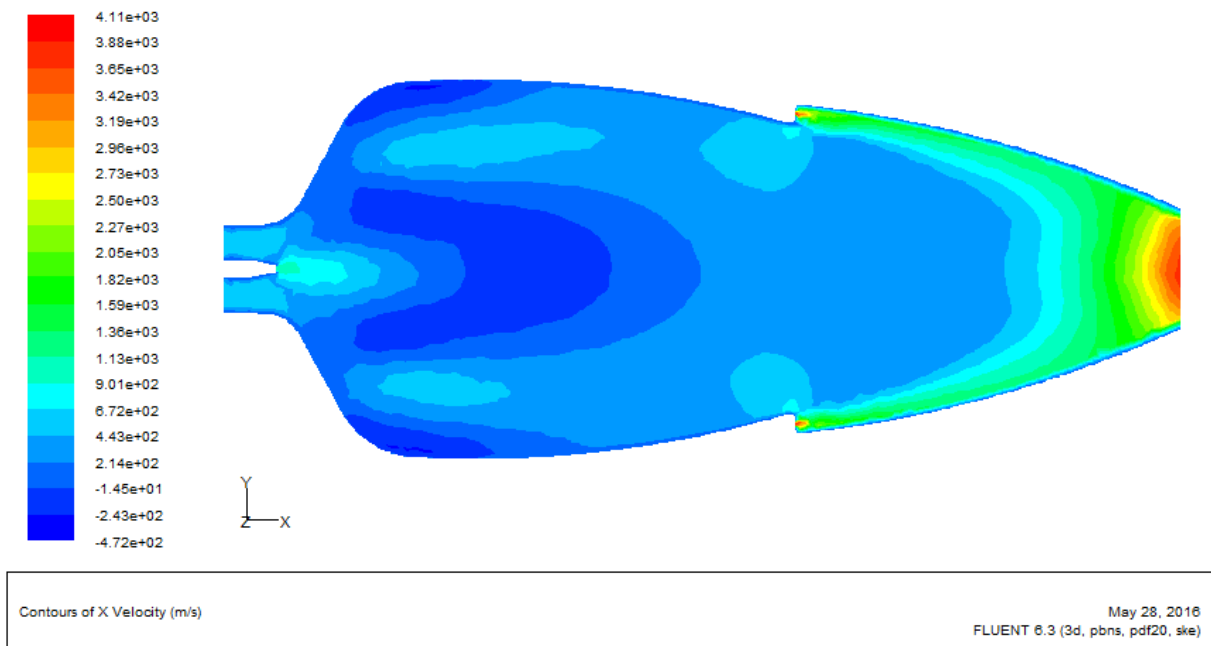


Figure 3.7 Contours des vitesses, plan xy ($z = 0$)

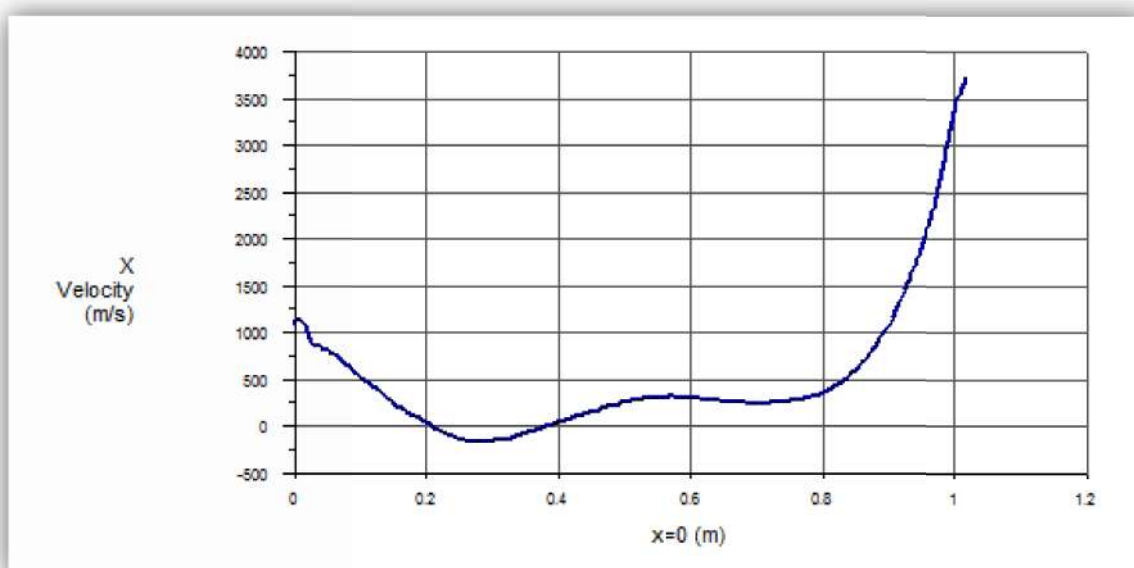


Figure 3.8 Profil de vitesse moyenne suivant l'axe x

▪ L'intensité de la turbulence

La figure 3.9 montre les contours de l'intensité de la turbulence suivant la direction de l'écoulement, les fortes valeurs sont observées à la zone de mixage (ce qui fait un bon mélange air/combustible), et aussi à la sortie de la chambre (l'effet de la grande vitesse).

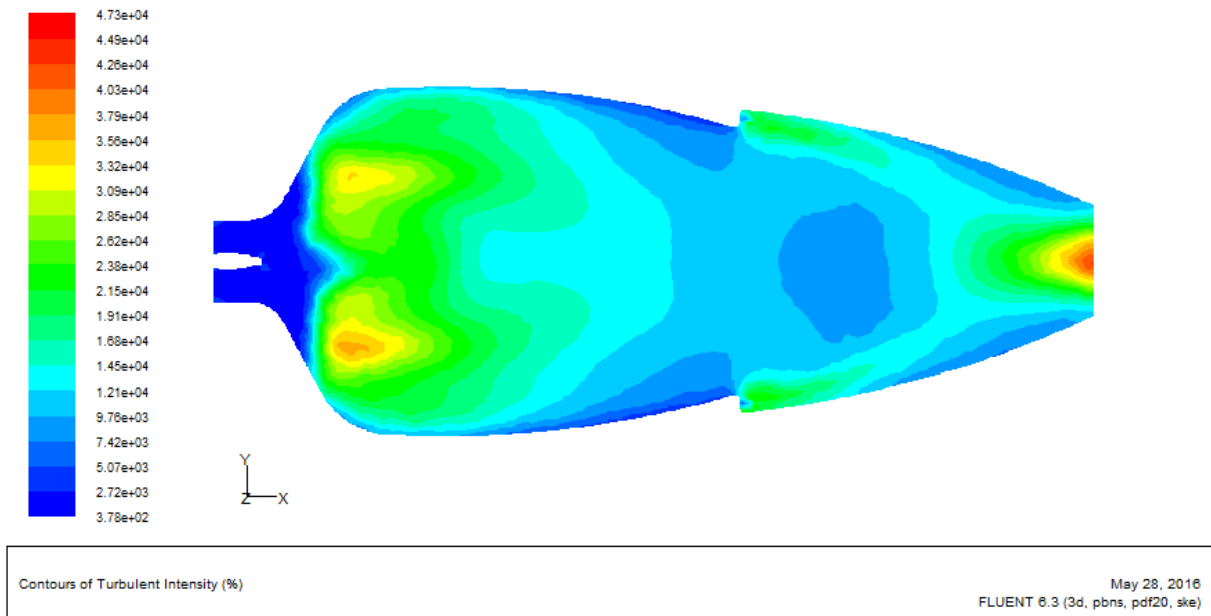


Figure 3.9 Intensité de la turbulence, plan x y (z = 0)

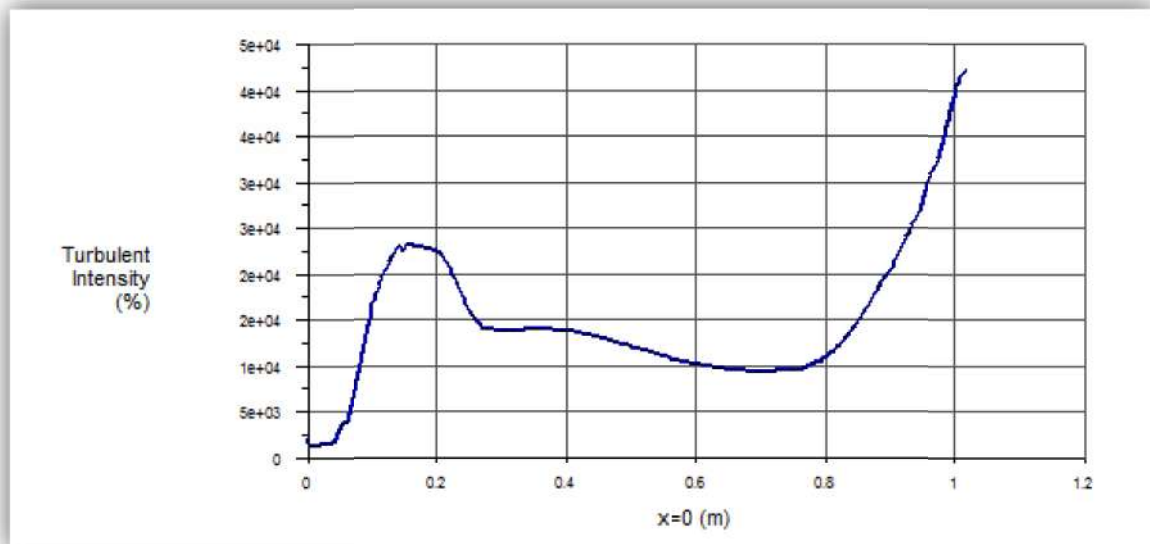


Figure 3.10 Profil montre l'intensité de la turbulence suivant l'axe x

▪ L'énergie cinétique turbulente

On observe dans la figure suivante la concentration de l'énergie cinétique turbulente, elle est concentrée à la zone de mixage, où elle aide de faire un bon mélange air/combustible pour obtenir une bonne combustion.

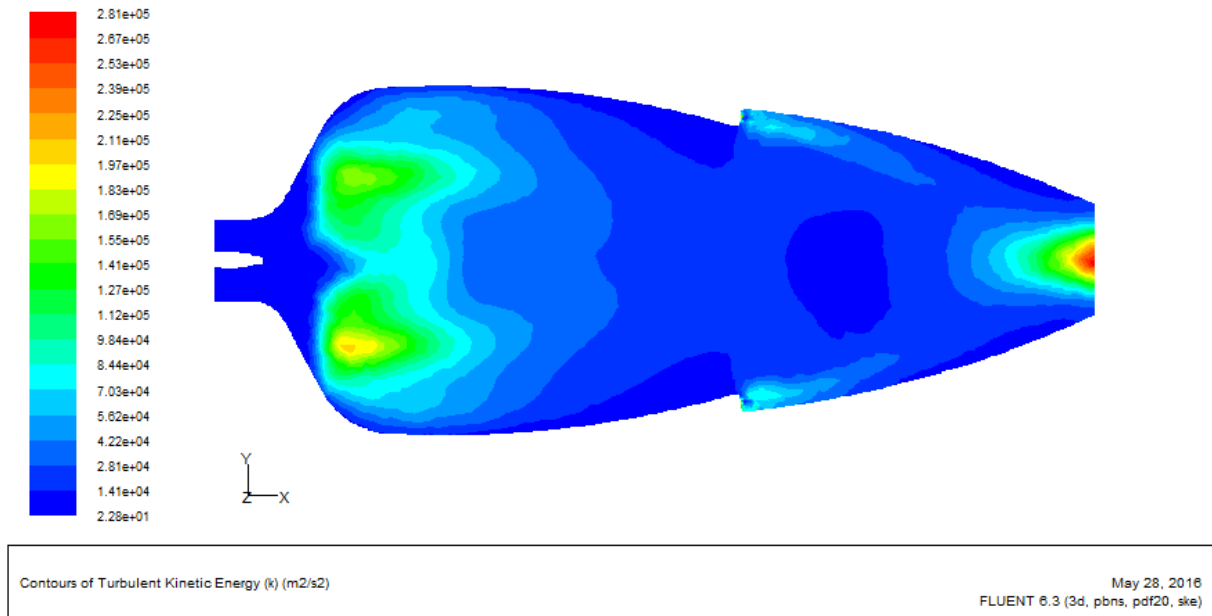


Figure 3.11 Energie cinétique turbulente, plan xy, ($z = 0$)

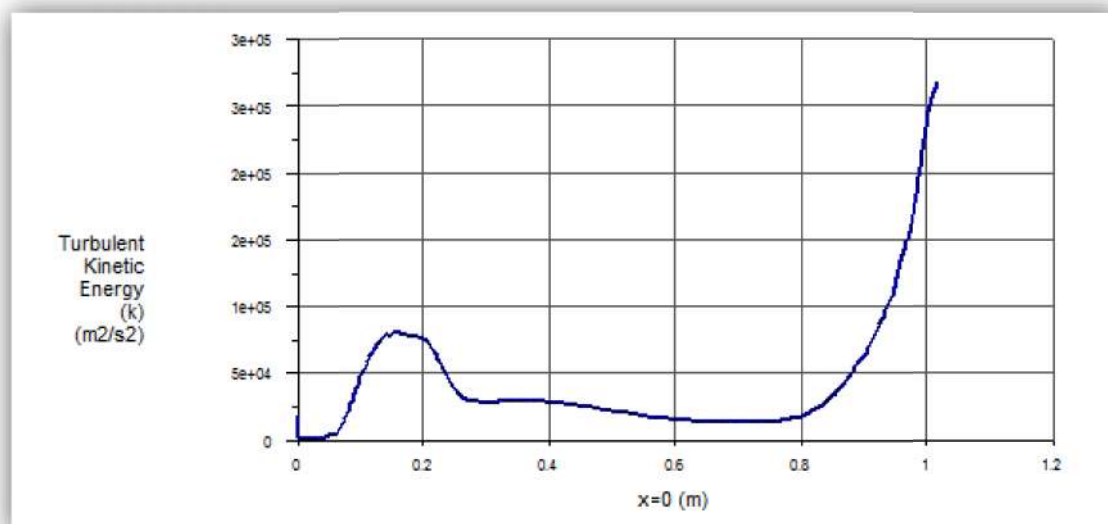


Figure 3.12 Profil montre l'énergie cinétique turbulente suivant x

▪ La viscosité turbulente

Dans la figure suivante on localise les zones dont la viscosité turbulente est élevée.

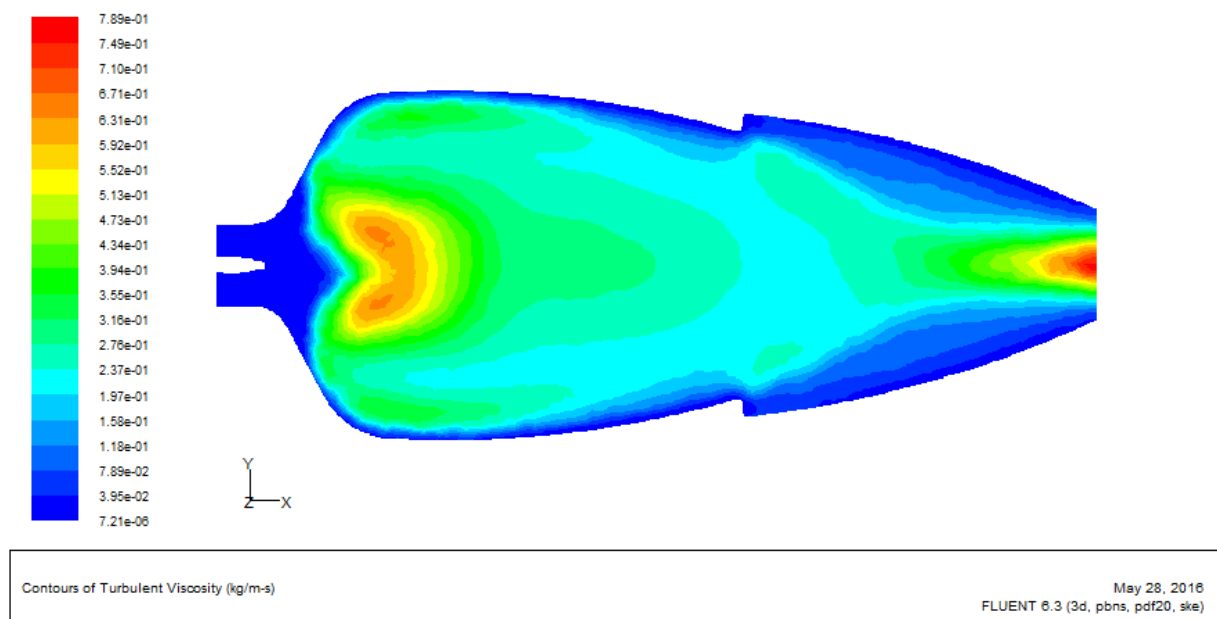


Figure 3.13 La viscosité turbulente

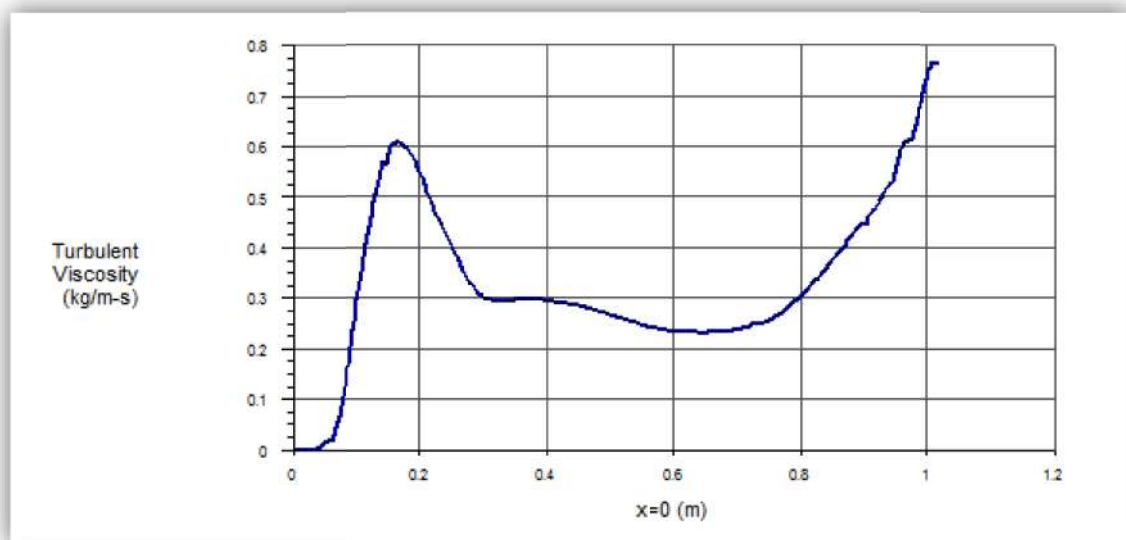


Figure 3.14 Profil montre la viscosité turbulente, suivant x

3.10.2 Champ thermique

Dans les tubes à flammes, la flamme ne touche jamais les parois pour éviter la surchauffe, comme on remarque dans nos résultats, où les grandes températures existent à l'intérieur du tube, loin de la paroi.

La température normale à l'intérieur de la chambre de combustion varie de 1871 °C à 1927 °C [13], dans notre cas la valeur maximum est 2170 K (1897 °C)

La température à la sortie de la chambre de combustion varie de 927 °C à 1593 °C [13], dans notre cas elle est de 1140 K (867 °C) à 1520 K (1247 °C), voir les figures 3.15 et 3.17.

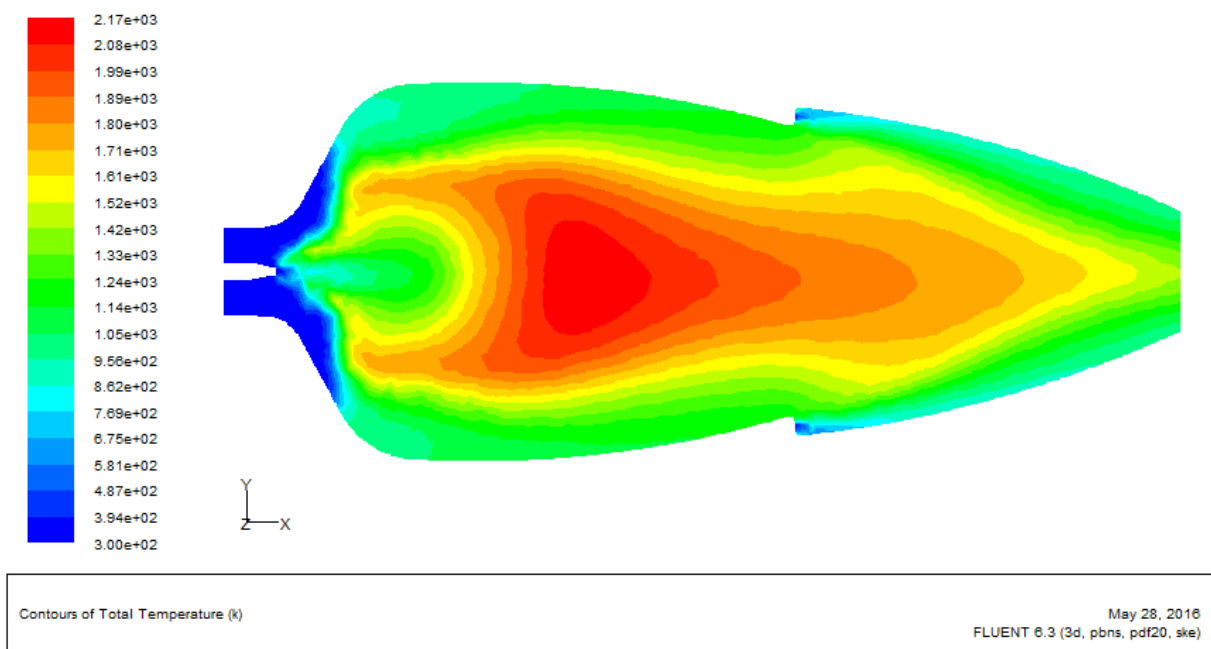


Figure 3.15 Champ de température, plan xy ($z = 0$)

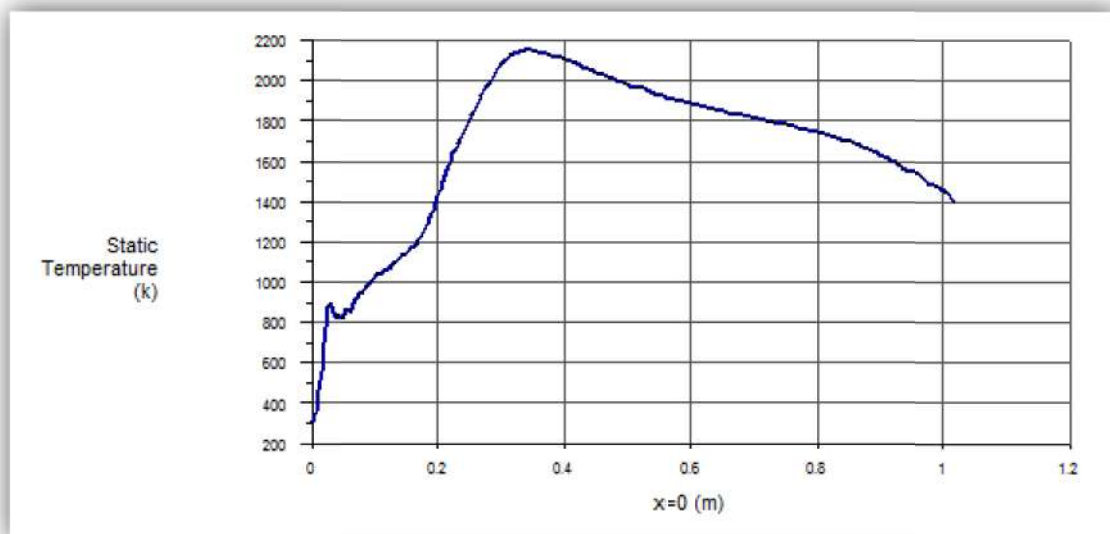


Figure 3.16 La distribution de la température suivant l'axe x

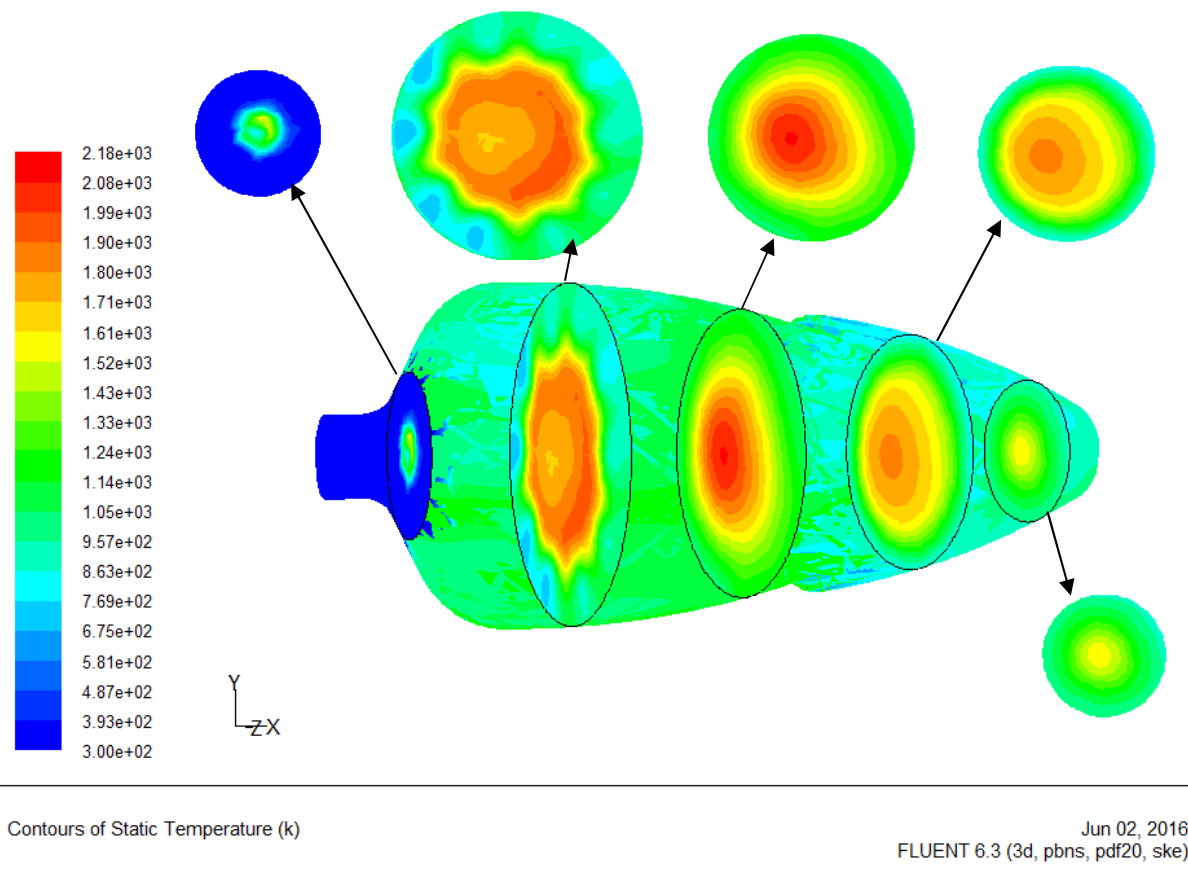


Figure 3.17 (5) coupes transversales montre la distribution de la température à l'intérieur de la chambre de combustion

3.10.3 Champs chimiques

▪ Le champ de la fraction massique de l'azote

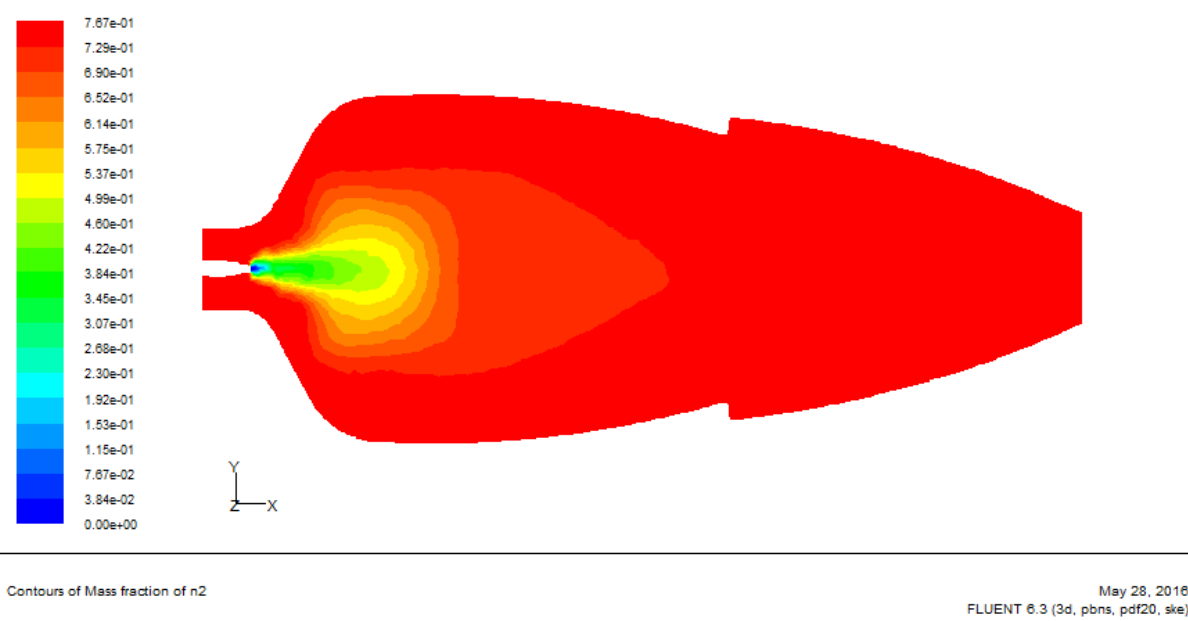


Figure 3.18 Contours de fraction massique du N_2 , plan xy ($z = 0$)

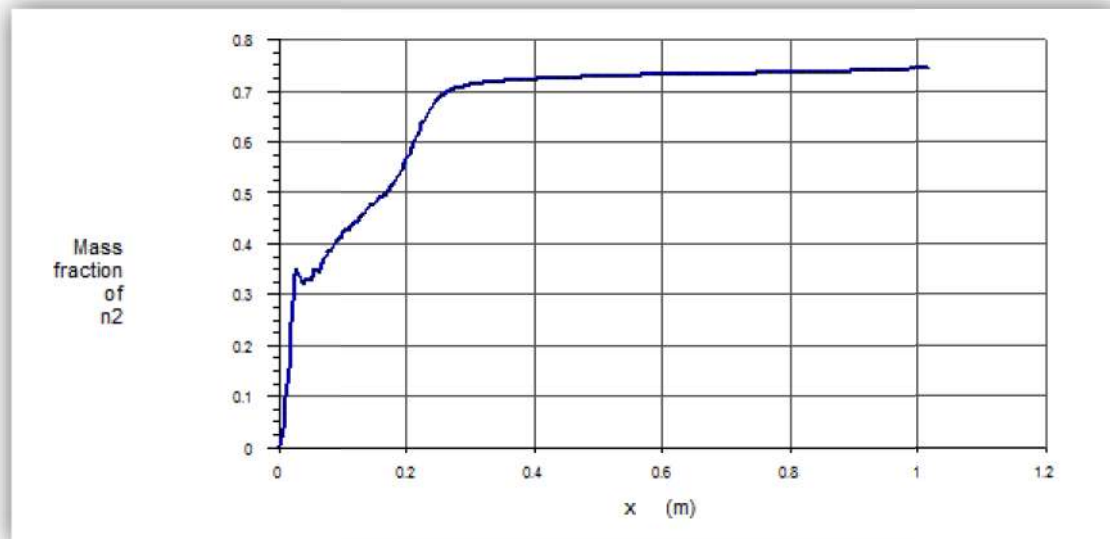


Figure 3.19 Profil montre la distribution de la fraction massique du N_2 suivant x

▪ Le champ de la fraction massique de l'oxygène

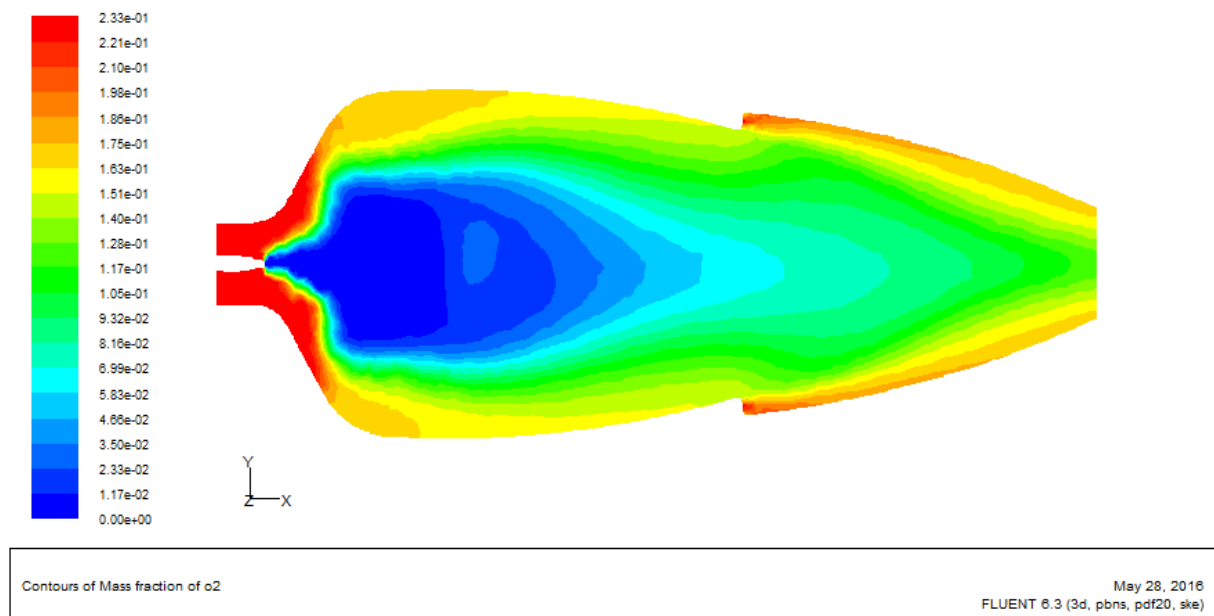


Figure 3.20 Contours de fraction massique d' O_2 , plan xy ($z = 0$)

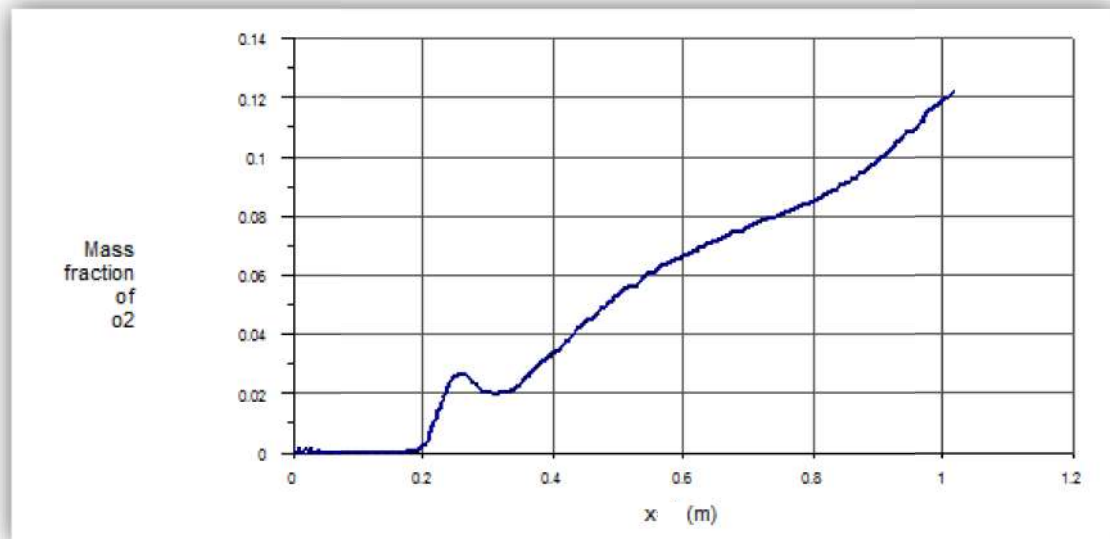


Figure 3.21 Profil montre la distribution de la fraction massique d' O_2 suivant x

▪ Le champ de la fraction massique du kérosène

On remarque la disparition de l'espèce combustible après petite distance au point d'injection. Cela montre la combustion totale de cette espèce.

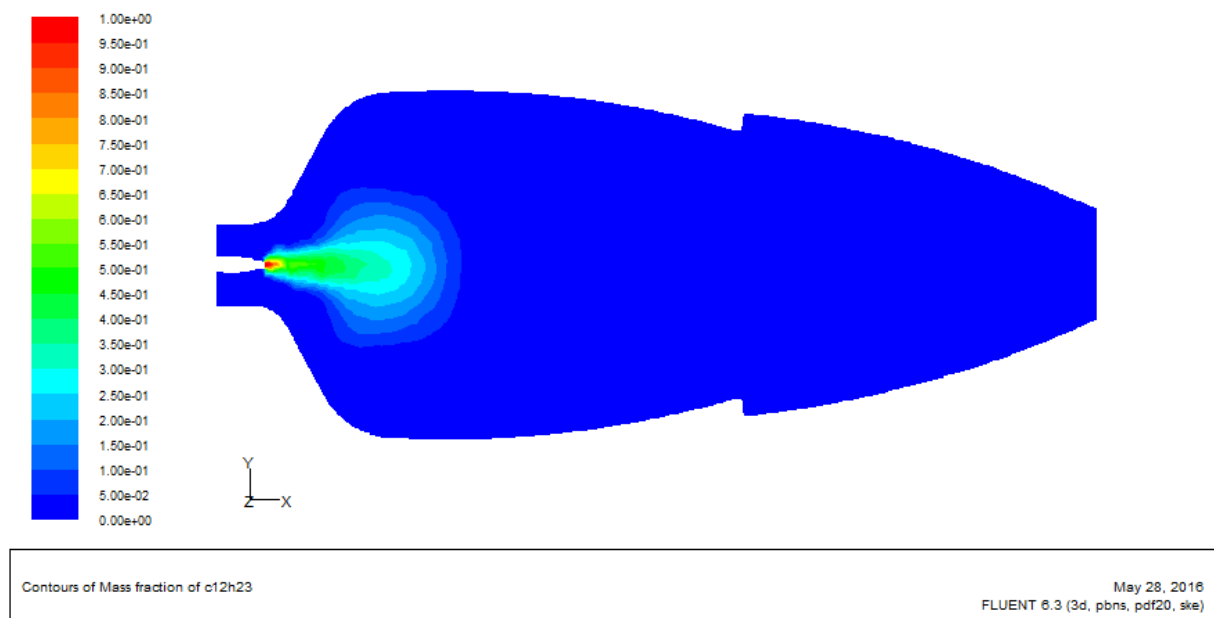


Figure 3.22 Contours de fraction massique du $C_{12}H_{23}$, plan xy ($z = 0$)

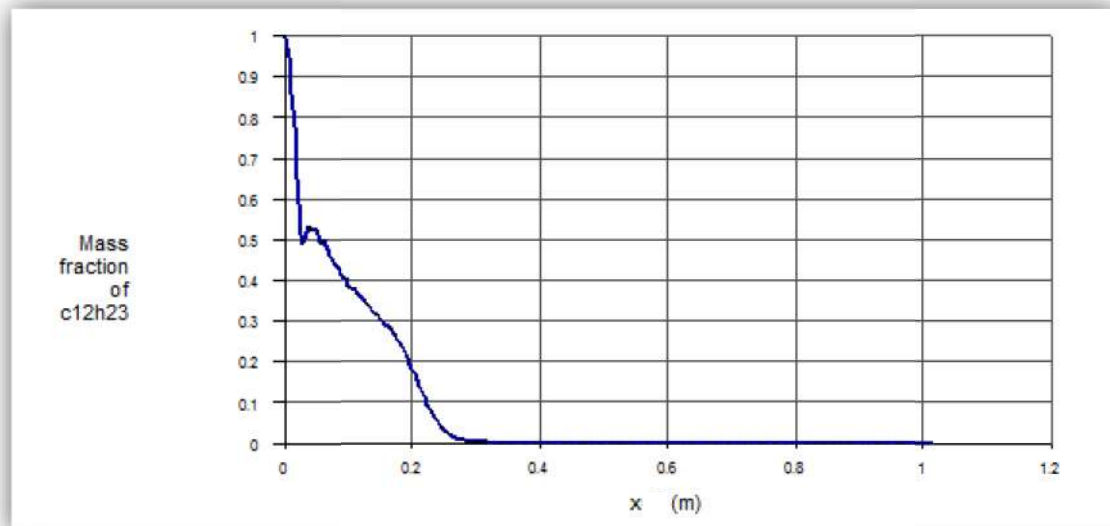


Figure 3.23 Profil montre la disparition du $C_{12}H_{23}$ suivant x

▪ **Le champ de la fraction massique du dioxyde de carbone**

On a connaissance que l'un des constitutions des produits de combustion est le dioxyde de carbone, c'est ce qui a indiqué par la figure 3.24

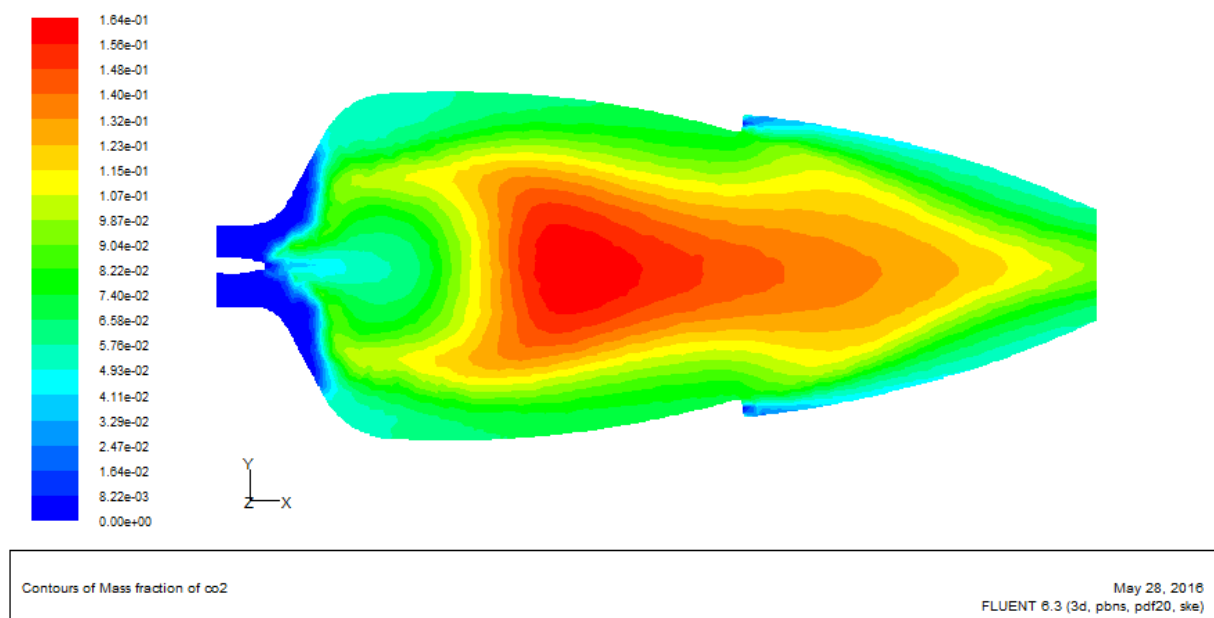
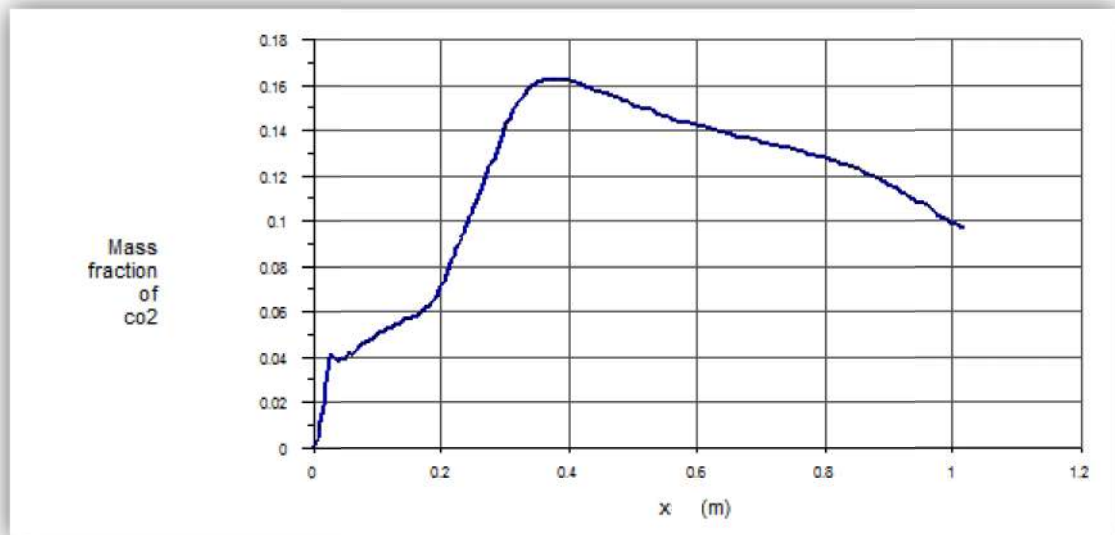


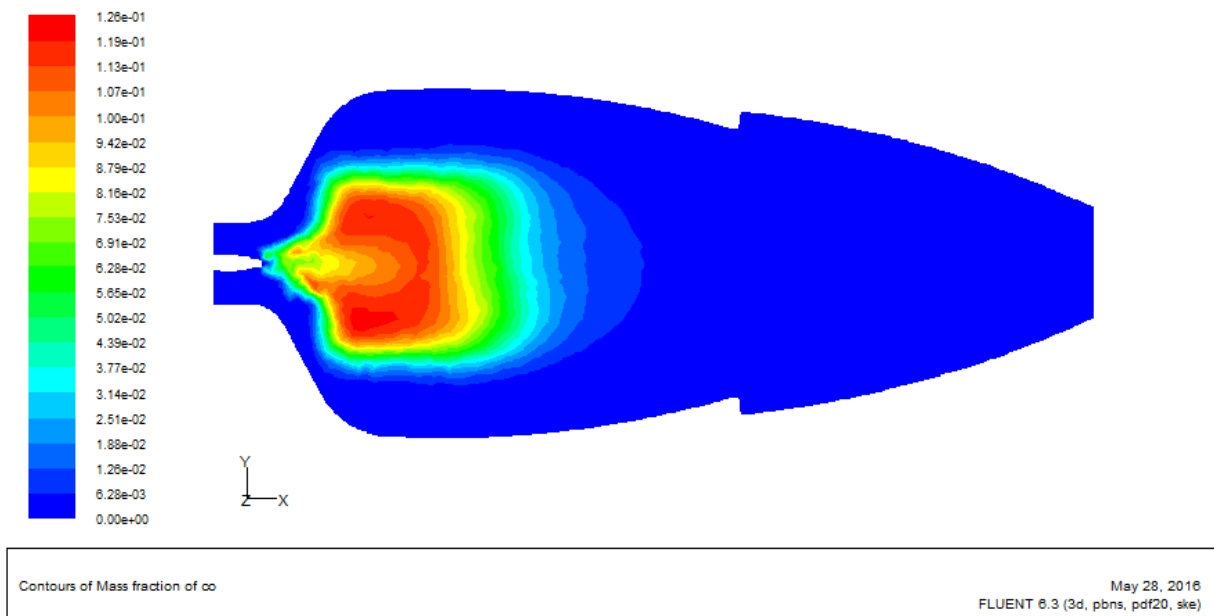
Figure 3.24 Contours de fraction massique de CO_2 , plan xy ($z = 0$)

Figure 3.25 Profil de fraction massique de CO₂ suivant x

▪ Le champ de la fraction massique de monoxyde de carbone

Nous considérons la disparition du monoxyde de carbone avant la sortie de la chambre de combustion, une avantage, car il est nocif.

La figure 3.26 montre la zone d'existence du CO, qu'on a minimisé le plus possible.

Figure 3.26 Contours de fraction massique de CO, plan xy ($z = 0$)

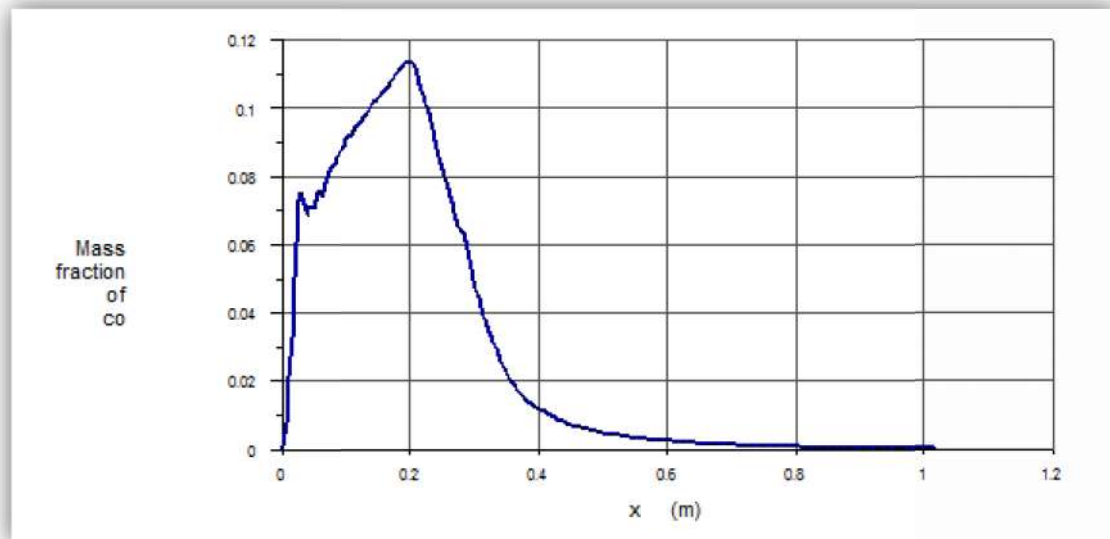
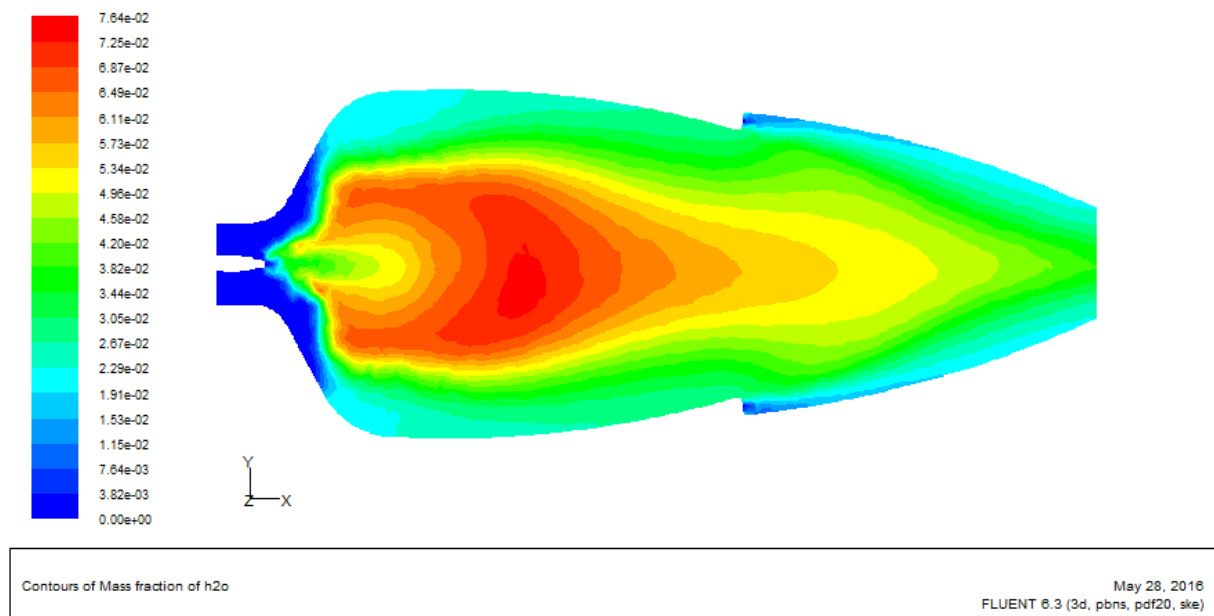


Figure 3.27 Profil de fraction massique de CO suivant x

- Le champ de la fraction massique de l'eau

Figure 3.28 Contours de fraction massique de H₂O, plan xy (z = 0)

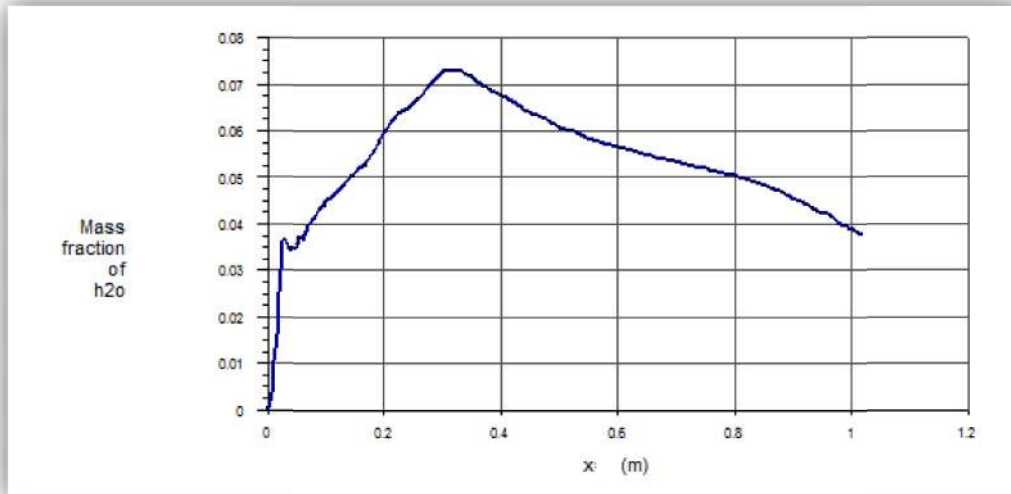


Figure 3.29 Profil de fraction massique de H_2O suivant x

Enfin, pour que la flamme soit stabilisée dans le foyer, il faut organiser la combustion dans des zones où la vitesse du fluide est très faible, afin que la propagation de la flamme par effet de conduction puisse compenser la convection des gaz vers l'aval. À cet effet, on utilise parfois des accroche-flammes, et, plus généralement, on organise des zones de recirculation stable comme on a fait dans notre cas (voir la figure 3.30).

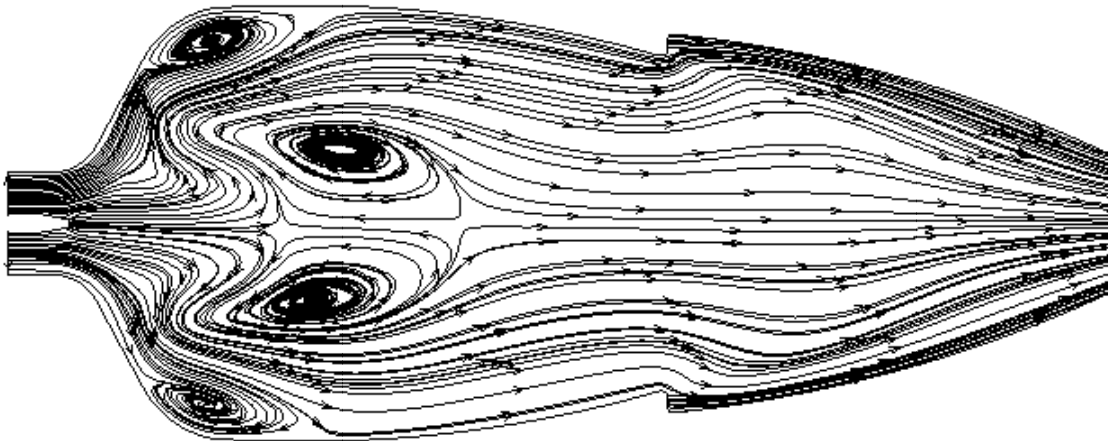


Figure 3.30 Vue en coupe montre les lignes de courants, et les zones de recirculation plan xy ($z = 0$)

3.11 Conclusion

D'après les résultats qu'on a trouvées, on conclut que, la turbulence perfectionne la combustion à partir l'amélioration du mélange qu'on brûle.