

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة مصطفى سطمبولي بمعسكر
Université Mustapha Stambouli de Mascara
Faculté des Sciences et Technologie
Département Génie Mécanique



THÈSE

De

DOCTORAT

Filière : *Mécanique*

Spécialité : *Energétique*

Présentée Par

BOUKHELEF Mohamed

Thème :

URANS/PDF dans une flamme de diffusion turbulente

Soutenue le 12 Décembre 2024, devant le jury composé de :

MERDJI Ali	Professeur	Université de Mascara	Président
BOUNIF Abdelhamid	Professeur	Université de Ain T'mouchent	Examineur
MILOUA El Hadj	Professeur	Université de Sidi Bel Abbes	Examineur
AISSA Abderrahmane	Professeur	Université de Mascara	Examineur
SAHNOUNE Rachid	MCA	Université de Mascara	Examineur
ALLICHE Mounir	Professeur	Université de Media	Invité
SENOUCI Mohammed	Professeur	ESGEE/USTO Oran	Rapporteur
MEROUANE Habib	Professeur	Université de Mascara	Co-Directeur de thèse

Dédicace

Je dédie ce travail :

À ma petite famille :

- Ma femme,*
- Mes enfants : Bochra, Meunir, Imad-eddine,
Abdelkarim*

À ma grande famille :

- Mes parents*
- Mes grands-parents*
- Mes frères et sœurs*
- Mes beaux-frères et belles-sœurs*

À toute ma famille élargie.

*Que cet humble ouvrage soit le reflet de ma gratitude
profonde, de mon respect inaltérable, et de la fierté
immense que je ressens à vos côtés.*

Mohamed Boukhelef

REMERCIEMENTS

Je suis profondément reconnaissant pour le soutien et les conseils que j'ai reçus tout au long de mon parcours de doctorat. En premier lieu, je tiens à exprimer ma plus profonde gratitude à mon directeur de thèse, Pr. Mohammed Senouci, dont l'expertise et l'acuité ont été inestimables dans la définition et le succès de mes recherches.

Je souhaite également remercier vivement mon co-promoteur, Pr. Habib Merouane, pour son soutien indéfectible, ses conseils avisés et son engagement dans la supervision de mon travail.

Un remerciement spécial est adressé au professeur Mounir Alliche de l'université Dr. Yahya Fares de Media, dont l'assistance, l'expertise et les conseils précieux ont grandement contribué à mon projet de recherche.

Je tiens également à exprimer ma gratitude au président du jury, Pr. Merdji Ali, ainsi qu'aux membres du jury, Pr. Bounif Abdelhamid, Pr. Aissa Abderrahmane, Pr. Miloua El Hadj et Dr. Sahnoune Rachid, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en évaluant ma thèse. Mes remerciements vont aussi à mes anciens enseignants, en particulier Pr. Bettaher Ahmed et à mon ancien promoteur d'ingénierie, Pr. Loukarfi Larbi.

Je tiens à exprimer ma gratitude à mes collègues de laboratoire et aux autres chercheurs, du laboratoire « *Laboratoire de physique quantique et de modélisation mathématique de la matière de l'université de Mascara (LPQ3M)* », pour l'environnement collaboratif que nous avons partagé. Les discussions stimulantes, les expériences partagées et la camaraderie dans notre laboratoire ont rendu ce voyage agréable et intellectuellement enrichissant.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude envers le Dr. Abelkader DJEBLI pour avoir mis à ma disposition les installations et les ressources essentielles à ma recherche. De plus, je souhaite adresser mes sincères remerciements au personnel administratif et technique pour leur aide précieuse et leur soutien constant tout au long de mes études.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance envers le Dr. Amar Abboub de l'université de Mascara, pour son soutien moral et ses encouragements qui m'ont permis de maintenir ma motivation dans mes recherches.

Un remerciement spécial est adressé au Dr. Djillali Boukhelef de l'université de Médéa. En effet, grâce à lui, j'ai pu reprendre mes études universitaires après une longue période d'arrêt. Son soutien et ses encouragements ont été déterminants dans cette reprise et ont contribué à la réussite de mon parcours académique.

Je tiens à remercier toute ma famille, en particulier ma mère, mon père et mes grands-parents, pour leur soutien et leur encouragement constants tout au long de ce parcours. Votre présence a été ma source de force et de motivation, et je suis profondément reconnaissant de vous avoir à mes côtés.

Toute ma gratitude va à M. Houari DAKI pour sa générosité et son soutien lors des moments où je me suis senti bloqué par les événements. Son soutien m'a été d'un grand réconfort et m'a permis de surmonter les obstacles avec confiance.

Je tiens à exprimer ma plus profonde gratitude à ma petite famille, qui a été d'une aide inébranlable tout au long des années de préparation de cette thèse. Leur compréhension a apaisé les moments difficiles. Leur présence bienveillante, leurs encouragements et leur patience ont constitué une source inestimable de force et d'inspiration pour mener ce projet à son terme.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude envers toutes les personnes qui m'ont apporté l'aide et le soutien tout au long de cette aventure, même si je ne parviens pas à les nommer tous individuellement. Votre contribution a été précieuse et a grandement contribué à la réussite de ce travail.

ملخص

تعتبر النمذجة الرقمية أمرا بالغ الأهمية لفهم شعلات الانتشار المضطربة، خاصة في الأنظمة الكيميائية المعقدة مثل أمزجة الهيدروجين / الهواء. يركز هذا البحث على تحليل هذه الشعلات باستخدام نموذج URANS وتقنية دالة كثافة الاحتمال PDF. بالإضافة إلى ذلك، قد تطرقنا في هذه الدراسة لتأثير ظروف الحقن على السلوك البنيوي لشعلات الهيدروجين. و هذا من أجل فهم السلوك غير المتوقع لهذه الشعلات حيث أن الهدف من وراء ذلك هو زيادة كفاءة المنظومات الطاقوية وتقليل انبعاثات و الملوثات الضارة.

يمكن محاكاة التفاعل بين الكيمياء والاضطراب باستخدام نموذج PDF لنمذجة الاشتعال. في هذه الأثناء، يمكن لنهج URANS تحديد التباين المكاني والزمني للتدفقات المضطربة. يجمع هذا البحث بين هاتين الطريقتين للحصول على فهم أفضل لمزج واشتعال الهيدروجين / الهواء.

الهدف من وراء نتائج هذه الدراسة هو تطوير أنظمة طاقة صديقة للبيئة ومع المحافظة على فعالية الأنظمة الطاقوية. من خلال تحسين فهمنا لسلوك الاشتعال المضطرب في مخاليط تفاعل H_2/Air ، يمكننا إنشاء مصادر طاقة أكثر استدامة وكفاءة. مما يوفر رؤى مهمة حول تحديات الطاقة اليوم.

الكلمات المفتاحية

PDF, إحتراق , لهب، انتشار، URANS، CFD هيدروجين، اضطراب

ABSTRACT

Numerical modeling is crucial for understanding turbulent diffusion flames, particularly in complex chemical systems like hydrogen/air mixtures. This research focuses on analyzing these flames using the URANS approach and the probability density function technique. Additionally, the study examines how injection conditions affect the structural behavior of such flames.

Understanding the unpredictable behavior of these flames is essential for increasing energy efficiency and reducing harmful pollutant emissions. The interaction between chemistry and turbulence can be simulated using the PDF model for combustion modeling. Meanwhile, the URANS approach can capture the spatial and temporal variability of turbulent flows. This research combines these two methods to gain a better understanding of the mixing and combustion of hydrogen/air involved in turbulent diffusion flames.

The results of this study will contribute to the development of energy systems that are both environmentally friendly and highly efficient. By enhancing our understanding of the behavior of turbulent combustion in H₂/Air reaction mixtures, we can create more sustainable and efficient energy sources.

KEYWORDS

Hydrogen, Turbulence, CFD, URANS, Flame, Diffusion, PDF, Combustion.

RESUME

La compréhension des flammes de diffusion turbulentes nécessite l'utilisation de la modélisation numérique, en particulier pour les systèmes chimiques complexes tels que les mélanges air/hydrogène. L'analyse des flammes de diffusion à l'aide du modèle URANS et de techniques de fonction de densité de probabilité est l'objectif principal de cette recherche. L'effet des conditions d'injection sur le comportement de la structure de telles flammes est aussi étudié.

La plus grande réactivité de l'hydrogène est ce qui donne aux feux de diffusion air/hydrogène leurs caractéristiques distinctives. Pour accroître l'efficacité énergétique et réduire les émissions polluantes nocives, il est essentiel de comprendre le comportement erratique de ces entités.

Il est possible de simuler l'interaction entre la chimie et la turbulence en utilisant l'approche PDF, tandis que le modèle URANS peut capturer la variabilité spatiale et temporelle des flux turbulents. Cette recherche vise à combiner de nombreuses méthodes afin d'offrir une connaissance approfondie des principes sous-jacents impliqués dans la combustion des flammes par diffusion air/hydrogène.

Les résultats de cette étude contribueront à la création de systèmes énergétiques à la fois respectueux de l'environnement et très efficaces en améliorant notre connaissance des événements de combustion turbulente dans les mélanges réactionnels.

Le développement de modèles sophistiqués comme URANS et PDF a fait de la simulation numérique un outil crucial dans l'étude des flammes turbulentes diffuses. Cette méthode permet d'éclairer les problèmes urgents du secteur de l'énergie d'aujourd'hui.

MOTS CLES

Hydrogène, Turbulence, CFD, URANS, Flamme, Diffusion, PDF, Combustion.

SOMMAIRE

ملخص.....	i
Abstract	iv
Keywords.....	iv
Résumé.....	v
Mots clés.....	v
Sommaire.....	vi
Liste des Figures	xi
Liste Des Tables.....	xiii
Liste des Abbreviations	xiv
Remerciements.....	i
Introduction generale.....	xix
Chapitre 1: Généralités sur la combustion et les flammes.....	1
1.1 Introduction.....	1
1.1.1 Chronologie de la combustion	1
1.2 Généralités sur la combustion	2
1.2.1 Définition.....	2
1.2.2 Les combustibles.....	3
1.2.3 Combustion Stœchiométrique.....	3
1.2.3.1 Rapport stœchiométrique air/combustible AFR_m	4
1.2.3.2 Pouvoirs calorifiques :	5
1.2.4 Combustion non stœchiométrique (réelle).....	5
1.3 Les Flammes	7
1.3.1 Classification des flammes :	7
1.3.2 Flammes laminaires prémélangées.....	8
1.3.3 Flamme de diffusion laminaire	9
1.3.3.1 Structure de base des flammes laminaires nonprémélangés.....	10
1.3.3.2 Caractéristiques des flammes de diffusion laminaires	11
1.3.4 Flammes prémélangées turbulentes :.....	12
1.3.5 Flammes de diffusion turbulentes	15

1.3.5.1	Structure typique d'une flamme de diffusion turbulente.....	15
1.3.5.2	Caractéristiques spécifiques aux flammes non-prémélangées turbulentes.....	16
1.4	Conclusion	16
Chapitre 2: Variables caractéristiques de la combustion		19
2.1	Introduction.....	19
2.2	Variables pour la caractérisation des flux réactifs.....	19
2.2.1	Fraction massique Y	19
2.2.2	Fraction molaire X.....	20
2.2.3	Facteurs stœchiométriques.....	20
2.2.4	Fraction de mélange Z	21
2.3	Nombres adimensionnels souvent utilisés dans la combustion.....	24
2.4	Conclusion	26
Chapitre 3: Equations gouvernantes pour les écoulements turbulents réactifs..		27
3.1	Introduction.....	27
3.2	Equations instantanées de base régissant les écoulements turbulents réactifs	27
3.2.1	Equation de continuité.....	27
3.2.2	Equation de conservation de quantité de mouvement	27
3.2.3	Equation de conservation de la fraction massique.....	28
3.2.4	Equation de conservation de l'énergie.....	28
3.2.5	Equation des gaz parfaits	28
3.3	Moyennement des équations gouvernantes :.....	28
3.3.1	Nécessité de moyenner	28
3.3.2	Fermeture des équations	31
3.4	Représentation de la turbulence	32
3.5	Modélisation de turbulence.....	35
3.6	Le Modèle de turbulence RANS	36
3.6.1	Le modèle Standard k- ϵ	38
3.6.2	Le modèle RNG-k- ϵ	38
3.6.3	Le modèle SST-k- ω	39
3.7	Modélisation pour la combustion non-prémélangée.....	41
3.7.1	Présentation de la technique PDF.....	41
3.7.1.1	Définition de la PDF.....	42

3.7.1.2 Propriétés de la PDF	42
3.7.1.3 Concept de la PDF présumée :	42
3.7.2 Fraction de mélange moyenne et sa variance	43
3.8 Modélisation du rayonnement et le modèle P1	45
3.9 Conclusion	46
Chapitre 4: Modélisation numérique	47
4.1 Introduction	47
4.2 Aperçu sur la mécanique des fluides numérique (CFD)	47
4.3 Discrétisation des équations de Navier-Stokes	48
4.4 Méthode de volume fini	50
4.4.1 Forme intégrale de la méthode de volumes finis	50
4.5 Le maillage	52
4.6 Discrétisation de l'équation semi-intégrale	53
4.6.1 Les mailles	53
4.6.2 Discrétisation	54
4.6.2.1 Discrétisation spatiale	55
4.6.2.2 La discrétisation temporelle	55
4.6.3 Schémas de la méthode des volumes finis	55
4.6.4 Schéma de MVF sur un maillage cartésien	57
4.6.5 Schéma de premier ordre en amont	58
4.7 Calcul du pas de temps pour un schéma à volumes finis	59
4.8 Schéma de volume fini du premier ordre en amont pour un domaine 2D	60
4.9 Conditions aux limites	61
4.9.1 Condition limite transmissive (gradient Zéro)	61
4.9.2 Condition au limite solide (pas d'écoulement)	62
4.9.2.1 Méthode directe	62
4.9.2.2 Méthode indirecte	62
4.10 Algorithmes de Couplage pression-vitesse	63
4.10.1 L'algorithme SIMPLE	64
4.10.2 L'algorithme PISO	65
4.11 Discrétisation de termes sources	67
4.12 Méthodes de relaxations de calcul	68

4.12.1	Méthode de sous-relaxation explicite	69
4.12.2	Méthodes implicites de sous-relaxation.....	69
4.12.2.1	Méthode de sous-relaxation de Patankar.....	69
4.12.2.2	Méthode de relaxation du facteur E.....	70
4.13	Organigramme de résolution numérique des équations d'écoulement.....	71
4.14	Modélisation de la turbulence et de la chimie.....	72
4.15	Maillage et conditions aux limites	73
4.16	Schéma numérique utilisée.....	74
4.17	Conclusion.....	75
	Chapitre 5: Résultats et Discussion	76
5.1	Introduction.....	76
5.2	Description du problème.....	76
5.3	Maillage et discrétisation du domaine d'étude.....	77
5.3.1	Discrétisation du domaine.....	77
5.3.2	Conditions aux limites (CL).....	77
5.3.3	Facteurs de relaxation et critères de convergence	78
5.4	Test de l'effet du maillage	79
5.5	Discussion des résultats	80
5.5.1	Etudes d'influence des conditions initiales.....	81
5.5.1.1	Validation des résultats pour le cas de combustion hydrogène-Oxygène :	81
5.5.1.1.1	Variation de la température selon la Direction radiale r/R_f :	81
5.5.1.1.2	Variation des fractions massiques Y selon la Direction radiale r/R_f :	83
5.5.1.2	Etude de l'effet de vitesse d'injection du fuel pour le cas H_2/O_2	92
5.5.1.2.1	Influence de la vitesse d'injection sur la dilution de l'hydrogène.....	96
5.5.1.2.2	IMPACT DE LA VITESSE D'INJECTION DE L'HYDROGENE SUR LA DEPLETION DU O_2 :	97
5.5.1.2.3	Prédiction des radicaux libres H, O et OH :	98
5.5.2	Cas de combustion hydrogène-Air (O_2+N_2).....	100
5.5.2.1	Influence de la vitesse de soufflage de l'air sur le comportement de la flamme :	101
Cas 1 : Le fuel en injecteur centrale :		101
5.5.2.2	Influence de la vitesse de soufflage de l'air sur la formation des Nox :	103
Cas 2 : L'air en injecteur centrale :		105
5.5.2.3	Validation des paramètres d'une flamme de diffusion H_2/O_2 et H_2/air	108

5.5.2.3.1	Profils de température :.....	108
5.5.2.3.2	Déplétion du H ₂ et O ₂ :.....	109
5.5.3	Analyse comparative de l'effet de vitesse d'injection de l'oxydant sur les paramètres d'une flamme de diffusion type H ₂ /O ₂ et H ₂ /air :.....	110
5.5.3.1	Profils de températures :	110
5.5.3.2	Comparaison de consommation de H ₂ et O ₂ pour le cas H ₂ /O ₂ et H ₂ /air :	112
5.5.3.3	Comparaison de formation du OH et H ₂ O pour le cas H ₂ /O ₂ et H ₂ /air	113
5.6	Influence du régime instationnaire sur le comportement de la flamme :.....	115
5.6.1	Modélisation numérique	115
5.6.2	Modèle de PDF	115
5.6.3	Discussion des résultats	116
5.6.3.1	Prédiction de la température.....	116
5.7	Conclusion :	121
	Conclusion générale	122
	Bibliographie	124
	Annexes.....

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1:Schéma de principe pour phénomène de combustion	3
Figure 1-2: Combustion théorique du méthane avec de l'air	4
Figure 1-3 : Diagramme d'inflammabilité du méthane	7
Figure 1-4: Classes et types de flammes	8
Figure 1-5: Bruleur de Bunsen	9
Figure 1-6 : Photo de flamme de diffusion laminaire de CH ₄ [21]	10
Figure 1-7 : Structure d'une flamme de diffusion [23]	11
Figure 1-8 : Flamme de diffusion (CaltechAUTHORS) [24]	12
Figure 1-9 : Bruleur de Bunsen[25]	13
Figure 1-10 : Diagramme de Borghi pour la classification des flammes turbulente[28][29].	15
Figure 1-11 : Flamme de diffusion turbulente (Sandia D)[31]	16
Figure 3-1 : Cascade d'énergie turbulente de Kolmogorov[56]	33
Figure 3-2 : Comparaison entre les principaux modèles de turbulence[50]	35
Figure 3-3 : Forme PDF de la Fonction bêta pour Z et γ [75]	45
Figure 4-1 : Modèles de maillage utilisé dans la Méthodes des volumes finis	53
Figure 4-2 : Représentation d'une cellule pou volume fini	54
Figure 4-3: Cellule cartésienne (i, j) montrant les vecteurs latéraux et les variables.	57
Figure 4-4 : Valeurs d'interface pour un FVS d'advection linéaire 2D Upwind	59
Figure 4-5 : Organigramme de l'algorithme SIMPLE	65
Figure 4-6 : Organigramme de l'algorithme PISO	66
Figure 4-7 : Un élément de volumes finis avec terme source[79]	67
Figure 4-8 : Représentation matricielle de l'équation (3.51)	69
Figure 4-9 : Organigramme de résolution numérique des EDP[71]	72
Figure 4-10 : Procédures de simulation	74
Figure 5-1 : Schéma de la chambre de combustion	77
Figure 5-2 : Conditions aux limites (CL)	78
Figure 5-3: Modèle de maillage utilisé	79
Figure 5-4 : Variation de la température en fonction de nombre de cellules de maillage (cas de l'air)	80
Figure 5-5: Représentation de la variation de température dans la direction radiale	83
Figure5-6 : Représentation de la distribution d'hydrogène dans la chambre de combustion.	84

Figure5-7 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{H_2} dans la direction radiale	86
Figure5-8 : Représentation de la distribution d'oxygène dans la chambre de combustion	87
Figure5-9 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{O_2} dans la direction radiale	88
Figure5-10 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{H_2O} dans la direction radiale	90
Figure5-11 : Représentation de la distribution de la fraction massique de Y_{OH} le long de x/L	91
Figure5-12 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{OH} dans la direction radiale	92
Figure 5-13 : Variation de la température en fonction vitesse d'injection de H_2 selon l'axe central.	94
Figure 5-14 :: Variation de la température en fonction vitesse d'injection de H_2 selon la direction radiale.	95
Figure 5-15 : Champs de températures influencés par vitesses d'injection d'hydrogène[108]	96
Figure 5-16 : variation de la consommation de H_2 sur l'axe central.	97
Figure 5-17 : variation des fractions massiques des réactants pour le cas de combustion H_2/O_2 .	98
Figure 5-18: variation des fractions massiques du radical OH pour le cas de combustion H_2/O_2 .	100
Figure 5-19 : Effet de la vitesse de soufflage de l'air sur la distribution de la température	101
Figure 5-20 : influence de la vitesse de soufflage de l'air sur les paramètres de combustion	103
Figure 5-21 : Effet de la vitesse de soufflage de l'air sur la formation des NO_x .	104
Figure 5-22 : Répartition des NO_x dans la chambre de combustion.	104
Figure 5-23 : Profils de température affecté par l'injection de l'air par le centre.	106
Figure 5-24 : Profils de température affecté par l'injection de l'air par le centre.	107
Figure 5-25 : Profils de température selon la direction axiale pour H_2/O_2 et H_2/air .	108
Figure 5-26 :: Profils de température pour H_2/O_2 et H_2/air .	109
Figure 5-27 : Profils de consommation de H_2 et O_2 selon la direction axiale pour H_2/O_2 et H_2/air .	110
Figure 5-28 : Profils de température pour différentes vitesses d'injection du comburant.	111
Figure 5-29 : Graphs de consommation de H_2 et O_2 pour différentes vitesses d'injection du comburant.	113
Figure 5-30: Graphs de production de H_2O et OH pour différentes vitesses d'injection du comburant.	114
Figure 5-31: Profils de production de OH et H_2O pour H_2/O_2 et H_2/air .	115
Figure 5-32 : Profils de température pour une flamme H_2/air pour différents modèles de turbulence.	116
Figure 5-33 : Vitesse d'hydrogène selon la direction axiale et radiale dans la chambre de combustion	117
Figure 5-34 : Profils de température en fonction du temps	118
Figure 5-35 : Profil de la flamme au-delà de 0,90 seconde	118
Figure 5-36 : Vitesse de propagation de flamme dans la direction longitudinale	119
Figure 5-37 : Vitesse de propagation de flamme dans la direction transversale	120
Figure 5-38 : Propagation de la flamme dans la direction transversale	120

LISTE DES TABLES

Table 2-1 : Fraction de mélange stœchiométrique Z pour quelques carburant	23
Table 3-1 : Valeurs des constantes ampériques du modèle k-ε proposé par Poinso et al. [62]	38
Table 3-2 : Valeurs des constantes ampériques du modèle RNG-k-ε. [64]	39
Table 3-3 : Valeurs des constantes ampériques du modèle SST-k-ω	40
Table. 5-1: Table récapitulative des conditions initiales pour le cas H ₂ /O ₂ .	78
Table. 5-2: Valeurs des facteurs de relaxation	79
Table. 5-3 : Mécanisme réactionnel pour H ₂ /O ₂ en état gazeuse [104]	81
Table. 5-4 : Nombre de Reynolds en fonction de vitesses d'injection de H ₂	93
Table. 5-5 : Valeur de vitesses d'injection de H ₂ dans des emplacements spécifique dans la chambre de combustion	93
Table. 5-6 : comparaison de profils de température pour une flamme de diffusion type H ₂ /air et H ₂ /O ₂ pour différentes vitesses d'injection du comburant	111

LISTE DES ABBREVIATIONS

	Unité	Acronymes
AFR _m	-	Rapport air/carburant stœchiométrique
AFT	-	Température de la flamme adiabatique
BTU	-	British Thermal Unit
CFD	-	Computational Fluid Dynamics
CFL	-	Nombre de Courant-Friedrichs-Lewy
CL	-	Conditions aux limites
CMC	-	Fermetures de moment conditionnel
CV	-	Volume de contrôle
DNS	-	Simulation numérique directe
EA	-	Coefficient d'excès d'air
EAD	-	Équations algébriques discrètes
EDP	-	Équations aux dérivées partielles
FAR _m	-	Rapport carburant/air
FDM	-	Méthode des différences finies
FVS	-	Schéma de volumes finis
GIEC	-	Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat
HPC	-	Ordinateurs à haute performance
LES	-	Large Eddy Simulation
LII	%	Limite inférieure d'inflammabilité
LIS	%	Limite supérieure d'inflammabilité
MVF	-	Méthode de volumes finis
PCI	J/kg	Pouvoir calorifique inférieur
PCS	J/kg	Pouvoir calorifique supérieur
PDF	-	Fonction de densité de probabilité
PISO	-	Pressure Implicit with Splitting of Operators
RANS	-	Reynolds-averaged Navier Stokes

SIMPLE	-	Semi-Implicit Method for Pressure- Linked Equations
SIMPLEC	-	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations-Consistent
SST	-	Shear Stress Transport
TEP, tep	-	Tonne équivalent pétrole
UHC	-	Hydrocarbures non brûlés
URANS	-	Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes

Exposant

$(n-1)$	-	Ordre de la réaction
---------	---	----------------------

Symboles grecques

V'_O	-	Coefficient stœchiométrique de l'oxydant
V'_F	-	Coefficient stœchiométrique de fuel
λ	-	Rapport d'excès d'air
Sc_c		Scalaire conservée
β	-	Caractéristique du fluide
ν	m^2/s	Viscosité cinématique
ρ	kg/m^3	Masse volumique
μ	Pa.s	Viscosité dynamique
\mathcal{E}	W/kg	Energie de dissipation
τ_K	s	Temps de Kolmogorov
τ_L	s	Temps chimique
μ_l	Pa.s	Viscosité laminaire
$\mu_t \nu_t$	Pa.s	Viscosité turbulente
μ	$Kg/(m.s)$	Viscosité dynamique
δ_{ij}	-	Kronecker
φ	-	Variable scalaire ou vectorielle
φ'	-	Composante fluctuante
$\bar{\varphi}$	-	Quantité moyennée

$\tilde{\varphi}$	-	Moyenne de Favre
φ''	-	Fluctuation ou oscillation (selon Favre)
τ_η	s	Temps de Kolmogorov
τ_t	s	Échelle de temps intégrale
β_d	K ⁻¹	Coefficient de dilatation
$\beta(a, b)$	-	Fonction beta
Γ	-	Fonction eulérienne de second espèce
$\dot{\omega}_T$	J/mol	Energie pour le processus chimique
ψ	-	Matrice de compressibilité
α^ϕ	-	Facteur de sous relaxation
ϕ	-	Variable de discrétisation (pression, vitesse, température, ...)
κ	-	Spectre d'ondes
λ_τ	m	Longueur caractéristique de gros tourbillons (Chap. 2)
τ_k	s	Temps caractéristique de petits tourbillons (Chap. 2)
τ_τ	s	Temps caractéristique de gros tourbillons (Chap. 2)
δ_l	m	Épaisseur de flamme laminaire
δ_p	m	Épaisseur de la zone de préchauffage
δ_r	m	Épaisseur de la zone de réaction
η	m	Longueur caractéristique de petits tourbillons
λ	W/(m.K)	Conductivité thermique
τ_c	s	Temps caractéristique associé à la réaction chimique
τ_t	s	Temps caractéristique associé au mélange
φ	-	Richesse du mélange
Lettres Latins		
W_k	g/mol	Masse molaire
k	-	Constante de vitesse de réaction

C_0	mol/l	Concentration initiale
a	m^2	Aire d'interface
k_g	$W/(m^2.K)$	Constante globale de transfert
m, m_j	mole	Masse molaire
N_1	W/m^2	Flux dans l'interface
n_t	W	Flux globale
e_t	J	Energie totale
e_s	J	Energie sensible
h	J	Enthalpie
k	J/kg	Energie cinétique turbulente locale
C_s	-	Constante de Smagorinsky
\dot{Q}_r	J	Source de chaleur
A_k	m^2	Surface de la cellule k
u_k^n	-	Valeur moyenne de U dans la cellule k au niveau de temps n
\vec{s}_k	-	Vecteur normal propre un côté de la cellule k
\vec{H}	-	Densité moyenne de flux
Δt	s	Pas du temps
Δt^*	s	Intervalle de temps caractéristique
a_F	-	Coefficient de cellule voisine
c	-	Variable de progression de la réaction
C_p	$J/(kg.K)$	Capacité thermique par unité de masse à pression constante
D	m	Diamètre ou longueur caractéristique
D, D_k	m^2/s	Diffusivité
E	J	Energie non chimique totale
p	Pa	Pression

P_k	J	Terme source
Pr	-	Nombre de Prandtl
q_i	W/m^2	Flux d'énergie
R	$J/(mol.K)$	Constante des gaz parfaits
r/R_f	-	Rayon normalisé
R_f	mm	Rayon du fuel (Hydrogène)
s	-	Rapport stœchiométrique
S_L	m/s	Vitesse de combustion laminaire
T	K, °C	Température
U	m/s	Vitesse d'écoulement
u	J	Energie interne (Chap.3)
u_g	m/s	Vitesse de front de flamme
V_L	m/s	Vitesse de propagation
x/L	-	Distance relative dans la direction axiale
X_k	-	Fraction molaire
Y_k	-	Fraction massique
Z	-	Fraction de mélange (parfois représentée par f ou ξ)
Nombres Adimensionnels		
Da	-	Nombre de Damköhler
Ka	-	Nombre de Karlovitz
Le	-	Nombre de Lewis
Re, Re_e	-	Nombre de Reynolds
Sc	-	Nombre de Schmidt

INTRODUCTION GENERALE

Dans le nouveau concept du mixte énergétique, la combustion reste un mécanisme clé de conversion de l'énergie, présentant une robustesse technologique significative pour les prochaines décennies. Sa flexibilité se manifeste dans des secteurs essentiels de la transformation énergétique, tels que la production thermique (chaudières domestiques et industrielles), la génération d'électricité (centrales thermiques, turbines à gaz) et les systèmes de propulsion (motorisation automobile, aéronautique). La recherche scientifique sur les phénomènes de combustion représente un enjeu majeur, en visant à mieux comprendre les mécanismes physico-chimiques impliqués et à optimiser les applications industrielles par l'innovation technologique. L'optimisation des systèmes de combustion exige une approche méthodologique multidisciplinaire, axée sur le développement des techniques de simulation avancées, l'analyse des mécanismes fondamentaux, et la modélisation des structures de flamme. L'objectif final est de parvenir à des modes de combustion plus efficaces, économiquement rentables et écologiquement durables

L'utilisation de codes numériques dans la dynamique des fluides pour modéliser les phénomènes de combustion s'est répandue dans la communauté scientifique et dans l'industrie. Cette approche permet aux chercheurs et aux ingénieurs d'optimiser les paramètres opérationnels des systèmes de combustion et d'améliorer la conception de nouveaux équipements industriels. Les deux principaux paramètres visés par cette approche sont l'amélioration de l'efficacité énergétique et la réduction des émissions polluantes.

Il est important de souligner que les expériences de combustion comportent des limites et des contraintes liées à des aspects techniques et de sécurité. Leur réalisation nécessite de faire partie d'une communauté scientifique spécialisée, équipée des ressources et des infrastructures adéquates. Cependant, avec l'émergence de nouvelles technologies, comme les ordinateurs à haute performance, de nouvelles opportunités s'offrent pour les simulations numériques. Ces technologies permettent aux chercheurs de modéliser et simuler les phénomènes de combustion de manière plus réaliste, en prenant en compte les interactions complexes entre les facteurs principaux influençant ce processus.

Les difficultés liées à la turbulence telles que la fermeture du tenseur de Reynolds et des termes de transport, s'ajoutent aux difficultés liées à la réaction chimique qui résident principalement dans la fermeture des termes sources relatifs à la combustion. Dans un écoulement réactif turbulent, les réactions chimiques et la turbulence s'interagissent fortement. Bien que, le dégagement de la chaleur modifie les structures turbulentes en accélérant l'écoulement et en changeant la viscosité. D'autre part, la turbulence peut modifier la structure de flamme et le taux de réaction.

Les simulations numériques utilisées pour modéliser les processus de combustion turbulente varient en fonction des besoins spécifiques et des ressources de calcul disponibles (DNS, LES, RANS, URANS, etc.). Le DNS et la LES, bien qu'elles offrent une description

plus précise aux descriptions des écoulements, mais, elles sont très coûteuses en termes de temps de calcul, principalement à cause de la complexité du comportement des écoulements étudiés près des parois. Ces méthodes sont donc difficiles à appliquer dans des situations industrielles à grande échelle.

Une alternative couramment utilisée pour les simulations d'écoulements industriels est l'approche RANS instationnaire (URANS), qui représente un compromis entre les différentes méthodes de simulation. En moyenne, les solutions URANS, qui intègrent les variations temporelles, sont plus réalistes que celles obtenues par la méthode RANS classique. Des études ont montré que les simulations URANS peuvent capturer efficacement des structures cohérentes à grande échelle dans divers types d'écoulements. Cette approche est donc largement utilisée dans l'industrie, car elle permet de simuler des conditions de fonctionnement plus proches de la réalité.

L'approche URANS se base sur la résolution des grandeurs physiques des processus de combustion turbulente moyennées dans le temps, tout en prenant en compte les effets instationnaires. Pour ce faire, elle utilise des modèles de fermeture permettant de résoudre les équations de conservation formulées en termes moyens. Parmi les modèles de fermeture utilisés, c'est le modèle SST-k- ω . Ce modèle est largement adopté dans les codes de simulation numérique (CFD) modernes, car il offre de bonnes performances pour une large gamme de problèmes d'écoulements turbulents, notamment ceux rencontrés dans les systèmes industriels.

Les processus de combustion peuvent générer deux types principaux de flammes : les flammes prémélangées et les flammes non-prémélangées, aussi appelées flammes de diffusion. Ces dernières sont utilisées dans un grand nombre d'applications industrielles et domestiques, notamment dans les foyers, les centrales électriques, les transports, ainsi que dans les fours industriels. Ces flammes présentent un avantage en termes de sécurité par rapport aux flammes prémélangées, car le combustible et le comburant sont introduits séparément dans le brûleur. Cette approche permet de réduire les risques d'explosion ou de retour de flamme, notamment dans des environnements où le contrôle des mélanges gazeuses est plus complexe.

Dans les flammes de diffusion turbulente, l'interaction entre les processus chimiques et la turbulence constitue un défi scientifique majeur dans la caractérisation des flammes de diffusion. La technique de la Fonction de Densité de Probabilité Présumée (PDF) émerge comme une solution prometteuse qui permet de lier la chimie et la turbulence. Tout en maintenant une efficacité numérique acceptable, ce qui la rend particulièrement adaptée aux modélisations industrielles à grande échelle qui nécessite une approche rigoureuse et économique en ressources de calcul.

Le choix de l'hydrogène s'impose comme une solution énergétique stratégique, motivé par la nécessité de revoir les modèles énergétiques carbonés responsables du réchauffement climatique. Dans le cadre de cette étude, l'hydrogène a été retenu comme vecteur principal d'investigation scientifique. Cette technologie offre une alternative révolutionnaire, où les processus de production et de combustion génèrent uniquement de la vapeur d'eau, transformant radicalement le schéma traditionnel d'émission de gaz à effet de serre. Sa valeur

réside dans sa capacité à proposer un vecteur énergétique propre qui maximise l'efficacité technique tout en minimisant l'impact environnemental.

Toutefois, il est essentiel de se rappeler que l'hydrogène n'est pas une source d'énergie primaire et qu'il doit être produit par d'autres moyens. Cette caractéristique fait de l'hydrogène un choix exemplaire pour les solutions énergétiques de l'ère post-pétrole.

Cette thèse vise principalement à explorer trois axes :

1-, mener une analyse détaillée et à moindre coût de la structure d'une flamme de diffusion turbulente d'hydrogène (H_2 /Air), afin d'approfondir notre compréhension du mélange et de la combustion hydrogène/air. Cela est réalisé en utilisant le modèle de Fonction de Densité de Probabilité Présumée (PDF) couplé à un modèle de turbulence RANS (RNG- k - ϵ ou SST- k - ω).

2-, l'étude se concentre sur l'examen des effets des conditions d'injection sur le comportement et la structure des flammes de diffusion turbulentes.

3- une comparaison des résultats obtenus avec des études expérimentales existantes pour évaluer l'efficacité du modèle utilisé (PDF présumée/SST- k - ω) dans la prédiction de la combustion d'hydrogène dans une flamme de diffusion turbulente.

La présente thèse est structurée en cinq chapitres, qui couvrent les différents aspects de la combustion et des écoulements réactifs turbulents. Après une introduction générale, le chapitre 1 est consacré aux généralités sur la combustion et les flammes. Le chapitre 2 se concentre aux variables caractéristiques de la combustion. Le chapitre 3 présente les équations gouvernantes pour les écoulements réactifs. Il explore également quelques notions sur la modélisation de combustion non-prémélangé et les principales stratégies de modélisation de la turbulence RANS pour capturer les mouvements chaotiques. Le chapitre 4 se penche sur la modélisation numérique pour les écoulements. Dont, on a donné une synthèse sur la méthode des volumes finis et ses schémas les plus utilisés, en outre, en mettant particulièrement l'accent sur les algorithmes de couplage pression-vitesse et les méthodes de relaxation dont ils jouent un rôle très important en matière de convergence et de la stabilité du calcul.

Dans le dernier chapitre de cette thèse, le chapitre 5, la discussion est menée sur les principaux résultats obtenus à l'aide des approches de modélisation RANS (*Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) et URANS (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*). Les résultats numériques sont comparés aux résultats expérimentaux afin d'évaluer la précision des modèles utilisés. Des analyses détaillées sont effectuées pour examiner la concordance entre les prédictions numériques et les mesures expérimentales, en mettant en évidence les similitudes et les différences. La comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux permet d'évaluer la validité et la performance des modèles de simulation utilisés. Les conclusions tirées de cette comparaison fournissent des informations précieuses sur les capacités des modèles de turbulence RANS et URANS à reproduire les phénomènes observés dans les flammes et les écoulements turbulents de nature réactif. Des recommandations sont formulées pour guider les futurs travaux de recherche, en mettant l'accent sur les aspects qui nécessitent des améliorations ou une exploration plus approfondie.

Chapitre 1: Généralités sur la combustion et les flammes

1.1 Introduction

La combustion fait partie intégrante de la vie humaine depuis l'Antiquité, car elle convertit l'énergie chimique stockée dans les combustibles en formes utiles telles que l'énergie thermique, mécanique et électrique. De nos jours, il est incroyable de vivre sans énergie externe, car les gens utilisent de nombreux appareils pour leur confort qui sont dépendants à cette énergie. Cependant, l'utilisation habituelle des systèmes de combustion a entraîné des crises énergétiques et une pollution de l'environnement issue principalement des combustibles fossiles.[1] Donc, Il est important de développer des dispositifs de combustion plus efficaces pour réduire la pollution environnementale. En outre, il est possible de remplacer les combustibles fossiles par des combustibles tels que l'hydrogène et la biomasse, ce qui pourrait rendre les systèmes de combustion plus efficaces, et plus bénéfiques d'un point de vue écologique. [2]

1.1.1 Chronologie de la combustion

La compréhension de la combustion a évolué au fil du temps. Les Grecs de l'Antiquité interprétaient la combustion en termes de doctrines philosophiques, selon lesquelles un certain "principe inflammable" était contenu dans tous les corps combustibles et s'échappait lorsque le corps était brûlé pour réagir avec l'air. Au XVII^e siècle, la théorie du phlogiston a permis de généraliser ce concept. Cependant, ce n'est qu'à la fin du XVIII^e siècle que le chimiste français Antoine-Laurent Lavoisier a proposé une approximation plus précise de la nature réelle de la combustion : il a découvert que les produits brûlés du soufre ou du phosphore pesaient plus lourd que les substances d'origine et a postulé que l'augmentation de poids était due à leur combinaison avec l'air. Lavoisier a fondé sa théorie sur des principes scientifiques importants tels que la loi de conservation de la matière.[3]

Au fil du temps, la science de la combustion est considérablement progressée, grâce aux recherches et aux études expérimentales de nombreux scientifiques. La théorie de la détonation, proposée par Sydney Chapman et Émile Jouguet au début du 20^e siècle est l'une des premières contributions à ce domaine. Cette théorie a permis de mieux comprendre la dynamique de la détonation, un phénomène qu'il s'agit d'une réaction chimique qui se propage rapidement dans un environnement enflammé. En outre, c'est la théorie qui conduit au développement des technologies de propulsion et les moteurs à réaction.[4][5]

En 1945, Frank et Kamenetskii ont développé la théorie de l'auto-combustion en régime permanent, qui a permis de comprendre comment les réactions de combustion peuvent se produire spontanément en introduisant le concept d'énergie d'activation, qui joue un rôle crucial dans la compréhension de la vitesse de réaction chimique.[6]

Par la suite, dans les années 1950, William Burke et E.J.R. Schumann ont inventé la théorie de la combustion qui a contribué de manière significative à la compréhension de l'impact de la vitesse des réactions chimiques sur la propagation des flammes. Cette théorie, souvent appelée approximation de la chimie rapide. Cette dernière a joué un rôle indispensable dans le développement des modèles de combustion, en particulier les flammes de diffusion.[4][7]

1.2 Généralités sur la combustion

1.2.1 Définition

La combustion est une réaction chimique d'oxydation exothermique. Lors de celle-ci, une certaine quantité de chaleur est libérée.[8] Le dégagement de chaleur qui peut être accompagné d'émission de lumière. Dans une réaction chimique, il y a un échange d'atomes entre les molécules en réaction due aux collisions des atomes de ces molécules. Le nombre d'atomes avant et après la réaction reste le même ce qui vérifie la loi de Lavoisier. Une réaction de combustion implique une espèce combustible et une espèce oxydante ayant des caractères distincts. Ces espèces peuvent être composés des atomes tels que C, H, O, N, etc. [4][9]

Les combustibles couramment utilisés contiennent en leurs majorité des atomes de C et de H, et sont appelées hydrocarbures. Les espèces oxydantes couramment utilisées contiennent des atomes de O et de N.

Le combustible et l'oxydant sont appelés réactifs. À la suite du processus d'oxydation, un ensemble d'autres espèces, appelées produits sont formés et qui sont accompagnés par une certaine quantité de chaleur qui est également dégagée.[10] La figure (1-1) donne une illustration pour un schéma de principe de fonctionnement du phénomène de la combustion.[11]

Pour déclencher la combustion, plusieurs facteurs peuvent être pris en compte, tels que la température, la pression et l'humidité de l'air ou du comburant ainsi que la nature du combustible utilisés. La température d'inflammation, qui est la température minimale nécessaire pour que le combustible s'enflamme, est un élément crucial dans ce processus. On distingue plusieurs types de combustion entre autres on trouve :

1. Combustion complète : C'est un processus de combustion dans lequel tous les combustibles sont brûlés de manière à produire uniquement de la chaleur, de l'eau (H_2O) et du dioxyde de carbone (CO_2).
2. Combustion incomplète : C'est un processus de combustion dans lequel le combustible n'est pas entièrement brûlé, ce qui peut entraîner la production de gaz nocifs tels que le monoxyde de carbone (CO).
3. Combustion lente : C'est un processus de combustion qui se déroule à une vitesse relativement faible et qui peut être utilisé pour chauffer une pièce de manière contrôlée.
4. Combustion rapide : C'est un processus de combustion qui se déroule à une vitesse relativement élevée et qui peut être à l'origine d'incendies ou d'explosions.
5. Combustion spontanée : C'est un processus de combustion qui se déclenche sans aucune source d'ignition apparente. Cela peut se produire lorsque certains matériaux sont exposés à une haute température ou à une atmosphère riche en oxygène.

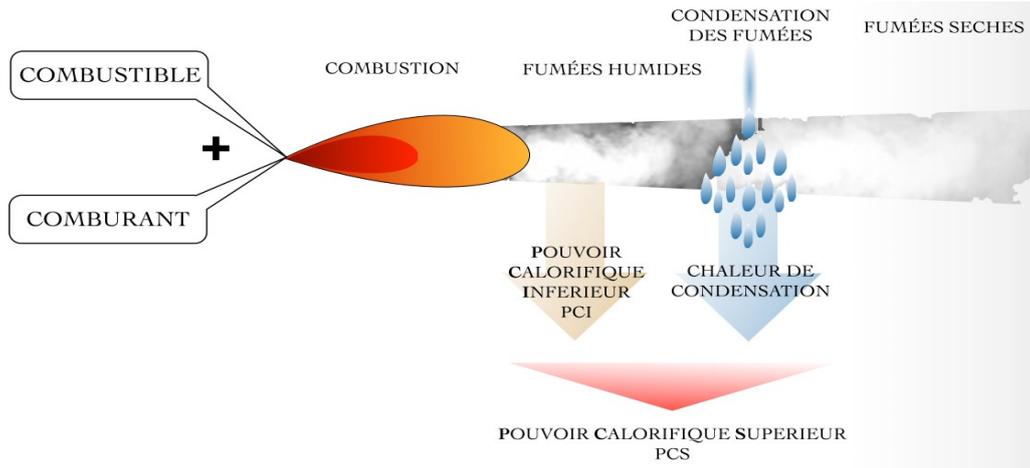


Figure 1-1: Schéma de principe pour phénomène de combustion

1.2.2 Les combustibles

Dans le domaine des processus thermo-chimiques, les combustibles représentent une ressource fondamentale de production d'énergie. Il s'agit des substances qui, en vertu de leur composition chimique, ont la capacité de libérer de l'énergie suite des réactions exothermiques, le plus souvent par combustion [6]. Les carburants d'aujourd'hui les plus utilisés sont des hydrocarbures dont la formule moléculaire générique est C_xH_y [4].

Les combustibles peuvent être classés de plusieurs manières. Du point de vue de l'appareil de combustion, les aspects critiques d'un combustible sont la façon dont il est introduit dans l'appareil de combustion et la façon dont il est brûlé. Sur cette base, l'ingénierie de la combustion classe les combustibles principalement en tant que combustibles gazeux, liquides ou solides [9].

1.2.3 Combustion Stœchiométrique

Le mot stœchiométrie est dérivé du mot grec « stoicheion », qui signifie élément. La plupart des combustions pratiques se produisent lorsque des combustibles fossiles ou leurs dérivés sont brûlés avec un agent oxydant (l'air). La plupart de ces combustibles ne contiennent que les éléments suivants : carbone, hydrogène, oxygène, azote et soufre. L'objectif de la stœchiométrie est de déterminer exactement la quantité d'air à utiliser pour oxyder complètement le combustible. Un mélange correct en termes de stœchiométrie carburant-air est défini comme un mélange qui donne des produits exacts : dioxyde de carbone, vapeur d'eau, azote et dioxyde de soufre, qui ne contiennent pas d'oxygène en excès dans le cas d'une combustion complète. La figure 1-2 montre un système de combustion avec combustion complète du méthane avec l'air, pour former du dioxyde de carbone, de l'azote et de l'eau [9].

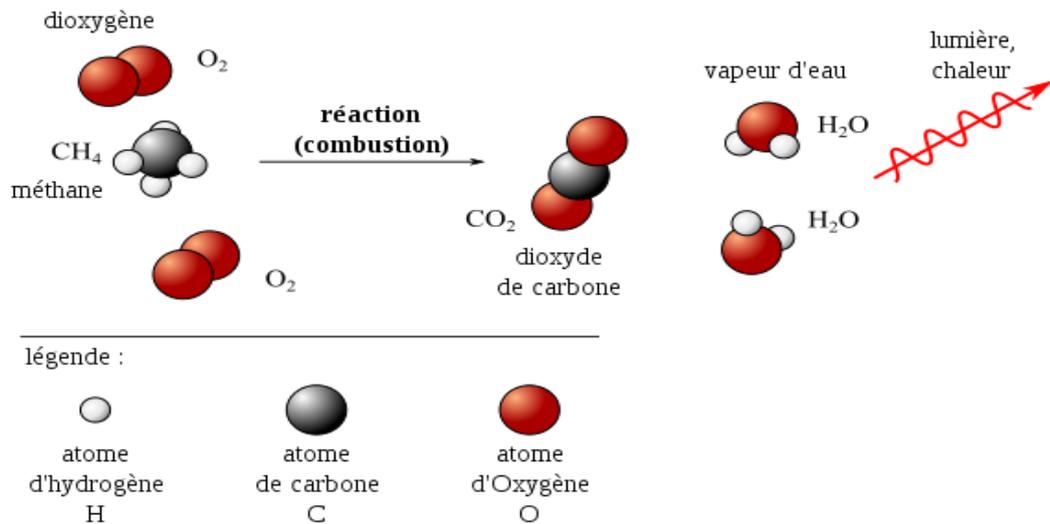
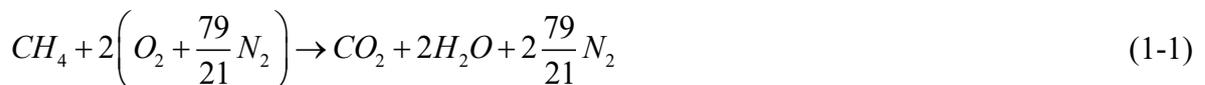


Figure 1-2: Combustion théorique du méthane avec de l'air[12]

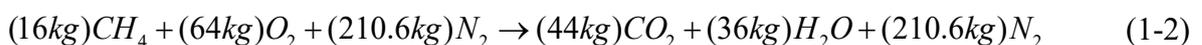
La combustion stœchiométrique est utilisée comme référence pour évaluer l'efficacité des systèmes de combustion réels, car elle offre un rendement énergétique théorique maximal. Cependant, il est rare que les conditions réelles de combustion soient proches de la stœchiométrie, c'est pourquoi on parle souvent de combustion incomplète ou non stœchiométrique [4].

Ainsi, une relation stœchiométrique équilibrée entre le méthane en tant que combustible et l'air en tant qu'oxydant ou comburant, dans l'hypothèse d'une combustion complète, peut être exprimée par l'équation suivante :

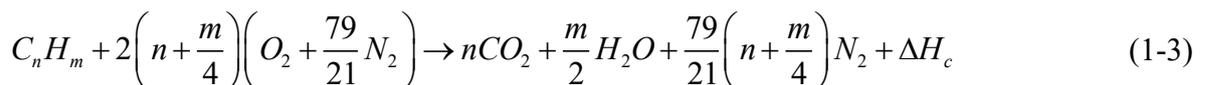


Cette équation décrit la scission des liens entre les atomes (ou éléments) formant les molécules de méthane et d'oxygène, et leur réarrangement pour construire les molécules de CO₂ et H₂O. Les coefficients de l'équation (1-1) sont déterminés à partir des proportions stœchiométriques des réactifs sans aucun excès de combustible ni d'oxydant [4].

Les équations chimiques peuvent également être écrites en termes de masses participant à la réaction, étant donné qu'une mole de n'importe quelle substance contient une masse quantitativement égale à sa masse moléculaire relative :



Dans un cas général, l'équation 1-1 peut être rédigée de la manière suivante :



ΔH_c : représente l'enthalpie de combustion.

1.2.3.1 Rapport stœchiométrique air/combustible AFR_m

Le rapport stœchiométrique air/combustible est la proportion idéale d'air et du carburant nécessaire pour que ce dernier soit complètement brûlé. Ou encore, c'est la quantité d'air

minimale requise pour une quantité donnée d'un combustible [4]. Le rapport air/combustible est défini par l'équation suivante :

$$AFR_m = \frac{137.84 \cdot \left(n + \frac{m}{4} \right)}{12n + m} \quad (1-4)$$

1.2.3.2 Pouvoirs calorifiques :

Le pouvoir calorifique des combustibles est un indicateur clé de la performance énergétique d'un combustible. Il est défini comme la quantité d'énergie thermique produite par la combustion complète pour un kilogramme d'un combustible dont les produits sont rapportés à la température de référence standard 298K [13]. Il est généralement exprimé en kJ/kg ou MJ/m³. Lorsque l'eau se condense pendant le processus de combustion, une quantité de chaleur supplémentaire sous forme de chaleur latente est récupérée. Par conséquent, la chaleur globale émise est le total cumulé de la chaleur provenant à la fois de la combustion et de la condensation. Cette chaleur totale est appelée pouvoir calorifique supérieur du combustible (PCS). En définissant le pouvoir calorifique inférieur (PCI) dans le cas où la quantité de chaleur de condensation de l'eau est négligée ou non récupérée [10].

En outre, d'après V. Arbuzov[14] la quantité de chaleur dégagée par unité de masse Q est le pouvoir calorifique inférieur du combustible. Dont, il est défini par l'équation (1-5) :

$$PCI = Q = C_{p_m} \cdot (T - T_0) \quad (1-5)$$

Avec ; C_{p_m} est la capacité thermique du mélange (air-combustible).

Selon les définitions des pouvoir calorifiques dans [10] et [15], la relation entre le pouvoir calorifique supérieur (PCS) et le pouvoir calorifique inférieur (PCI) peut être exprimée par l'équation suivante :

$$PCS = PCI + \left(\frac{m_{H_2O}}{m_{fuel}} \right) \cdot L_v, \quad (1-6)$$

Où m_{H_2O} est la masse d'eau dans les produits, m_{fuel} est la masse de combustible et L_v est la chaleur latente de vaporisation de l'eau à 25°C, qui est de 2440 kJ/kg d'eau. La masse d'eau inclut l'humidité dans le combustible ainsi que l'eau formée à partir de l'hydrogène dans le combustible [16].

1.2.4 Combustion non stœchiométrique (réelle)

La combustion réelle (non stœchiométrique) décrit le processus de combustion qui se produit dans les systèmes réels, tels que les moteurs, les chaudières et les générateurs électriques. Les conditions réelles de combustion peuvent varier en raison de nombreux facteurs tels que la température, la pression, la vitesse d'écoulement, les propriétés physiques et chimiques des réactifs.

Les conditions réelles peuvent être différentes des conditions théoriques de combustion stœchiométrique. La combustion réelle est souvent incomplète, c'est pourquoi elle est moins

efficace en termes de rendement énergétique par rapport à la combustion stœchiométrique théorique. [16] [10] la combustion réelle est généralement caractérisée par les facteurs qui sont définis ci-après.

a) *Mélanges non stœchiométriques :*

Les mélanges non stœchiométriques désignent les compositions d'un mélange chimique où les proportions des réactifs ne correspondent pas aux rapports exacts définis par la stœchiométrie, il y a soit un excès de carburant (mélange riche), soit un excès d'oxydant (mélange pauvre). Les mélanges riches peuvent entraîner une combustion incomplète et des sous-produits tels que le monoxyde de carbone, tandis que pour les mélanges pauvres, le combustible est totalement consommé ce qui conduit à une combustion complète, mais l'abondance d'oxygène peut provoquer des émissions des polluants tels que les oxydes d'azote (NO_x) [9].

b) *Rapport de richesse ϕ :*

Le rapport de richesse d'un mélange est un paramètre qui permet de décrire la proportion de combustible par rapport à l'oxygène présent dans un système de combustion. Il est généralement exprimé sous la forme d'un rapport ou d'un pourcentage et permet de déterminer si un mélange est riche ($\phi > 1$) ou pauvre ($\phi < 1$) en combustible.

Le rapport de richesse d'un mélange est défini par la relation suivante :

$$\phi = \frac{\left(\frac{m_{fuel}}{m_{air}} \right)_{reel}}{\left(\frac{m_{fuel}}{m_{air}} \right)_{stœchiométrique}} \quad (1-7)$$

c) *Coefficient d'excès d'air EA :*

Le coefficient d'excès d'air (EA) est un paramètre utilisé pour décrire la proportion d'oxygène présent dans un système de combustion par rapport à la quantité d'oxygène nécessaire pour une combustion complète. Il est généralement exprimé sous la forme d'un rapport ou d'un pourcentage. ' Le coefficient d'excès d'air est défini comme le rapport entre la quantité d'oxygène réellement présente dans un mélange et la quantité nécessaire pour une combustion complète.

$$EA = \frac{1-\phi}{\phi} \times 100\% \quad (1-8)$$

d) *Limites d'inflammabilité :*

Les limites d'inflammabilité sont essentielles pour comprendre les risques de combustion et d'explosion associés à divers gaz. Ces limites sont généralement définies comme la limite inférieure d'inflammabilité (LII) et la limite supérieure d'inflammabilité (LSI). Par exemple, la LII du méthane est de 5 % en volume, et sa LSI augmente avec l'humidité relative. Les limites d'inflammabilité peuvent être influencées par plusieurs facteurs, notamment la température, la pression et la présence d'autres gaz. Par exemple, le gaz naturel présente une bonne inflammabilité pour les applications de combustion, mais aussi des risques d'explosion élevés

dans les processus d'injection d'air dans les champs pétrolifères en raison de ses limites d'inflammabilité étendues à haute température et à haute pression [8][17].

Le diagramme d'inflammabilité du méthane Figure (1-3) est utilisé pour visualiser les limites de la zone dans laquelle le méthane peut s'enflammer en présence d'oxygène. La zone en orange représente les proportionnalités de méthane et d'oxygène qui rendent le mélange inflammable, c'est-à-dire où il y a suffisamment de méthane pour qu'une étincelle ou une source d'inflammation puisse déclencher une combustion. La ligne en bleu indique les compositions où la proportion d'oxygène est la même que dans l'air (environ 21%), tandis que la ligne en rouge indique les compositions où la proportion d'oxygène est celle nécessaire pour que le méthane brûle complètement (combustion stœchiométrique). Enfin, la ligne brune indique les compositions contenant 12% d'oxygène, qui est en deçà de la limite inférieure nécessaire pour la combustion.

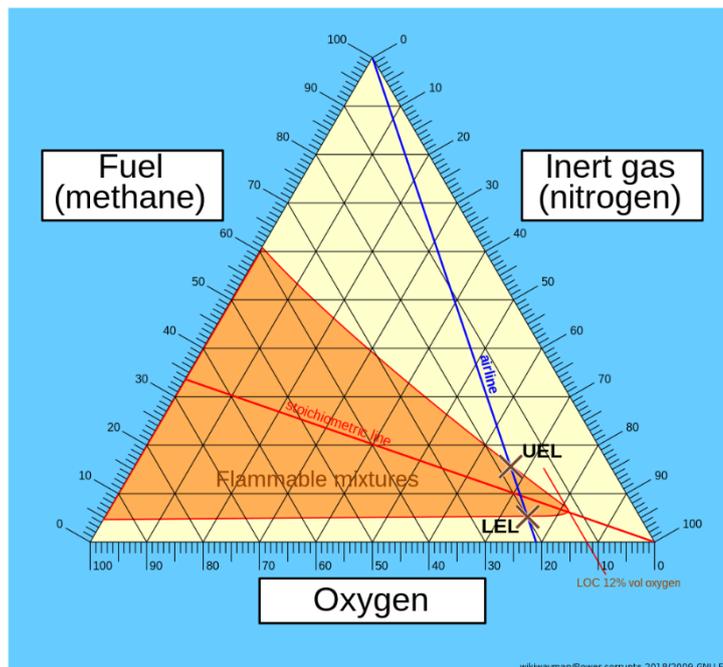


Figure 1-3 : Diagramme d'inflammabilité du méthane[18]

1.3 Les Flammes

Les flammes peuvent être classées en deux catégories principales. Les flammes de diffusion et les flammes prémélangées. Il existe cependant un troisième mode de combustion, qui ressemble beaucoup aux conditions observées en milieu industriel : la combustion partiellement prémélangée, qui est une fusion des deux formes susmentionnées.

1.3.1 Classification des flammes :

1- *Flammes prémélangées* ; pour le cas où les réactifs sont mélangés avant d'approcher la région de la flamme. Ces flammes ne peuvent être obtenues que si le mélange initial de combustible et d'oxydant se situe entre certaines limites de composition appelées limites de l'inflammabilité. Lorsque le flux de gaz est laminaire, la flamme est laminaire et a une frontière de flamme lisse.

2- *Flamme de diffusion aussi appelées non-prémélangé* ; pour cas où le carburant et l’oxydant sont initialement séparés avant toute procédure de combustion dont. Le mélange de combustible et d'air et la combustion se produisent à l'interface Lorsque le flux de gaz est turbulent, la flamme est turbulente et la frontière de flamme est ridée ou brisée. La turbulence augmente la vitesse de flamme. Pour les flammes par diffusion, le taux de mélange des réactifs détermine la vitesse de flamme et la réaction a lieu à l'interface entre le carburant et l'oxydant.

Selon le régime d’écoulement des réactifs de combustion, les flammes sont encore classées en deux autres sous-catégories ; laminaires ou turbulents. Et encore, si ces derniers ont une dépendance au facteur du temps. On parle alors d’une flamme stationnaire pour le cas où la flamme ne présente aucun changement en fonction du temps. Dans le cas contraire, la flamme est dite en propagation. La figure 1-4 présente une présentation des différentes classes de flammes.

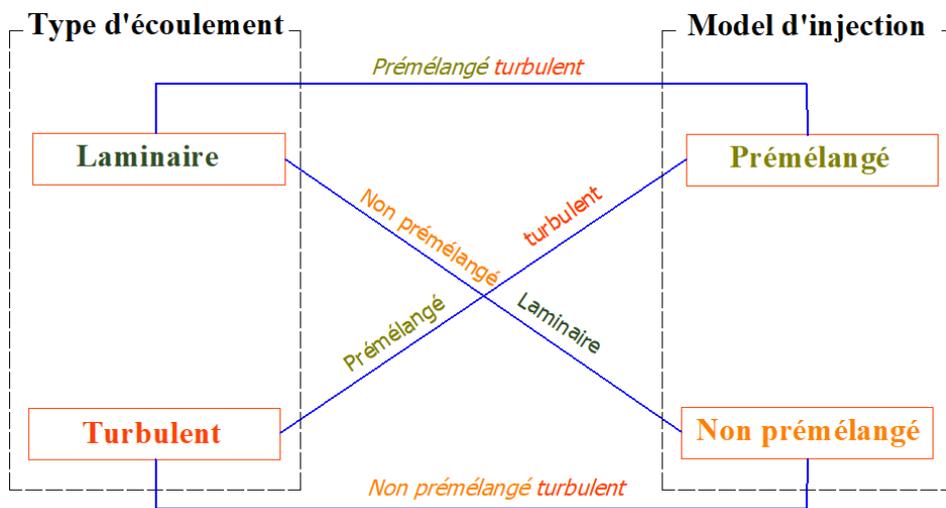


Figure 1-4: Classes et types de flammes

Les deux types de flammes sont également différenciés physiquement, pour des conditions thermodynamiques des états initiaux définies, le système prémélangé a une température adiabatique d'équilibre définie et, pour la situation idéalisée d'une flamme plane dans un champ de débit unidimensionnel, il a une vitesse de combustion adiabatique définie ou un flux massique équivalent dans une direction normale à sa surface. Une flamme de diffusion non tendue n'a pas de paramètres définis de manière aussi simple [9] [16].

Les flammes stationnaires sont stabilisées par l'écoulement dans un brûleur ou par l'écoulement dans une région de stagnation. Dans un mélange combustible calme, une source d'allumage déclenche une flamme qui se propage vers l'extérieur depuis la source d'allumage à la vitesse de flamme laminaire. Avec un volume suffisant, une flamme passera en détonation, qui se propage à plus de 1000 m/s et crée une augmentation de pression.

1.3.2 Flammes laminaires prémélangées

Les flammes prémélangées laminaires sont un mode de combustion fondamental dans les environnements contrôlés qui nécessitent un mélange combustible-comburant homogène dont le phénomène de combustion s’effectue en douceur à des nombres de Reynolds modérés qui imposent la vitesse à laquelle le front de flamme progresse à travers le mélange combustible.

Cette vitesse est un facteur déterminant de la stabilité et de l'intensité de la flamme, influencée par divers facteurs, notamment la température, la pression et le rapport combustible/air.

Selon [20] et [23], les flammes prémélangées laminaires ont une vitesse de flamme unique pour un mélange carburant-oxydant donné qui est inférieure à un mètre par seconde pour les mélanges hydrocarbures-air à une pression et température ambiantes.

Dans ce type de flammes le processus de combustion est généralement déclenché par une étincelle qui stimule le mélange air-combustible au repos en provoquant l'apparition d'une zone de réaction chimique qui se propage dans le mélange constitué par les réactifs. Par conséquent, une réaction chimique exothermique a lieu dans une zone mince (le front de flamme) qui se propage à une vitesse modérée.

Pour le cas des mélanges stœchiométriques (hydrocarbures-air ambiant) dont la flamme résultante se déplace à une vitesse de 20 à 40cm/s. La chute de pression à travers la flamme est très faible. Elle est de l'ordre 1Pa et une épaisseur très mince (inférieure à 1mm) tandis que la température dans la zone de réaction est élevée (2200-2600K) [20][19].

La chaleur dégagée par les réactions est conduite des parties à haute température vers les parties à plus basse température de la zone de réaction pour entretenir la flamme. Le brûleur Bunsen, représenté schématiquement à la figure 1-5, est un exemple d'une flamme stationnaire laminaire et prémélangée [19].

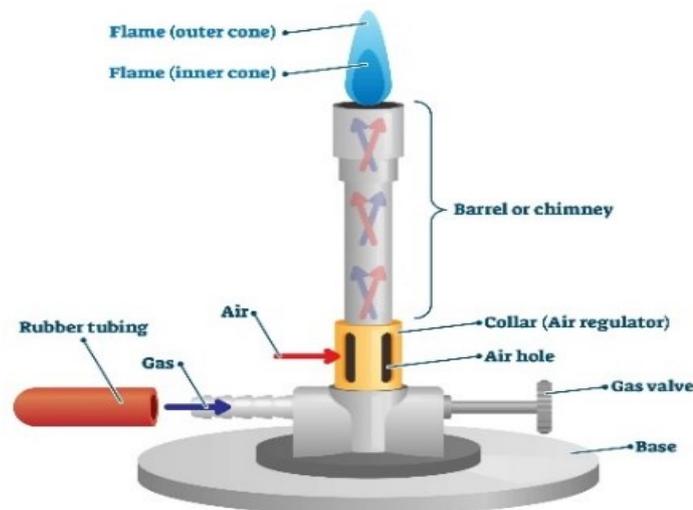


Figure 1-5: Bruleur de Bunsen[19]

1.3.3 Flamme de diffusion laminaire

Les flammes de diffusion, également appelées '*flammes non-prémélangées*', apparaissent grâce à un processus dans lequel le combustible et l'oxydant sont introduits dans la chambre de combustion séparément par des canaux distincts. La catégorisation des flammes non-prémélangées englobe une variété de configurations, chacune adaptée à des applications et à des critères de performance spécifiques. On distingue des différents types de flammes non-prémélangées, comme les flammes de diffusion à jet, à co-courant, à contre-courant et à flux croisé, qui se différencient par leur configuration d'alimentation en combustible et en oxydant.[11]

En outre, l'interaction et l'amalgame des réactifs sont primordiaux dans l'étude des flammes de diffusion qui est un phénomène très complexe. Dont, cette complexité brouille les définitions directes de la vitesse de combustion et de la direction de propagation de la flamme. On signale que le processus de combustion se déroule principalement près de la jonction fuel-oxydant. À cet endroit, la combustion est fortement influencée par la vitesse à laquelle le mélange se produit, éclipsant l'influence des taux de réaction chimique. Par conséquent, l'introduction du nombre de Damköhler (Da) est essentielle dans ce cadre [20]; il s'agit d'une quantité sans dimension qui définit l'équilibre entre les échelles de temps de mélange et de réaction chimique.

Le nombre de Damköhler (Da) est donné par la relation suivante :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} \quad (1-9)$$

Avec :

τ_t : Temps caractéristique associé au mélange

τ_c : Temps caractéristique associé à la réaction chimique

La figure (1-6) ci-après est une illustration d'une flamme de diffusion laminaire. Elle s'agit d'une image directe de la flamme de diffusion et l'image CH^* mesurée au bord d'attaque avec une caméra CCD (filtre CH^* : $431,4 \text{ nm} \pm 1,5 \text{ nm}$, efficacité de transmission 40 %). Comme il est montré dans la figure, le bord d'attaque de la flamme de diffusion se trouvait à environ 1,5 mm de la sortie du brûleur, soit $r = 6,2 \text{ mm}$ et $x = 1,5 \text{ mm}$. [21]

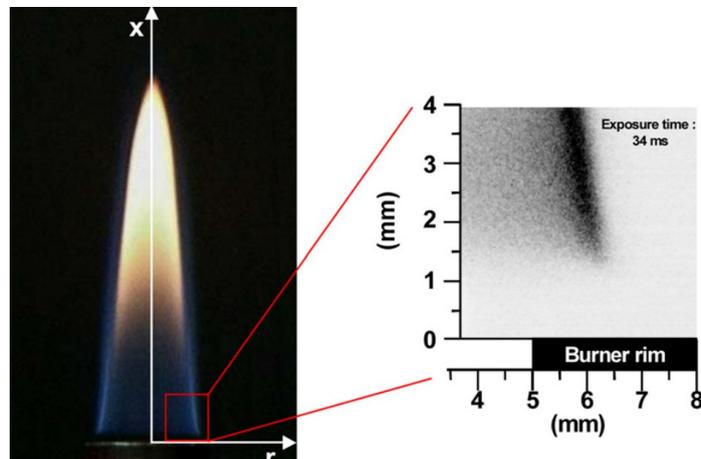


Figure 1-6 : Photo de flamme de diffusion laminaire de CH_4 [21]

1.3.3.1 Structure de base des flammes laminaires nonprémélangés

Dans les flammes de diffusion la vitesse à laquelle les réactions chimiques se dépasse souvent la vitesse de diffusion à laquelle les réactifs gazeux viennent de se mélanger. Plus précisément, la durée nécessaire à l'achèvement d'une réaction chimique (τ_c) est considérablement plus courte que le temps de diffusion des réactifs (τ_d), ce qui caractérisé par un nombre de Damköhler important. Ce déséquilibre montre que la cinétique chimique est plus critique que les processus de diffusion dans ce type de flammes. Cela signifie que la vitesse des

réactions chimiques a un impact plus important sur l'efficacité et les propriétés de la flamme. En conséquence,

- (1) la réaction chimique se produit dans une zone étroite près de l'interface entre le combustible et l'oxydant.
- (2) les concentrations de combustible et d'oxydant sont très faibles dans la zone de réaction (où la plupart des produits sont générés).
- (3) le taux de combustion est régulé par le taux auquel le combustible et l'oxydant s'écoulent dans la zone de réaction.

1.3.3.2 Caractéristiques des flammes de diffusion laminaires

Les flammes de diffusion se distinguent des flammes prémélangées par leurs zones de réaction plus larges, facilitant les variations de composition et les réactions chimiques résultant de la diffusion mutuelle des réactifs et des produits. Hottel et Hawthorne ont été les premiers à réaliser des études approfondies sur la distribution des espèces dans une flamme de diffusion laminaire, en se concentrant sur la distribution radiale dans une flamme de type H₂-air. Des recherches ultérieures ont permis de quantifier méticuleusement les variations de température et d'espèces dans un brûleur Wolfhard-Parker alimenté en méthane. Dont, il a été constaté que l'architecture d'une flamme à diffusion laminaire est influencée par l'abondance relative des particules [22].

La forme la plus commune d'une flamme de diffusion se caractérise par l'injection uniquement du combustible par un injecteur, tandis que le comburant ou l'oxydant requis pour la réaction provient de l'air ambiant. La réaction ne peut se produire dans la zone de jonction fuel-oxydant. Les distributions massiques sont illustrées de manière schématique dans la figure 1-7.

Le taux de réaction des flammes de diffusion est principalement régulé par la diffusion, qui contrôle l'approvisionnement des réactifs dans la flamme. La structure des flammes de diffusion est souvent décrite en termes de rapport entre les temps de diffusion, de réaction chimique et de convection du courant.[23]

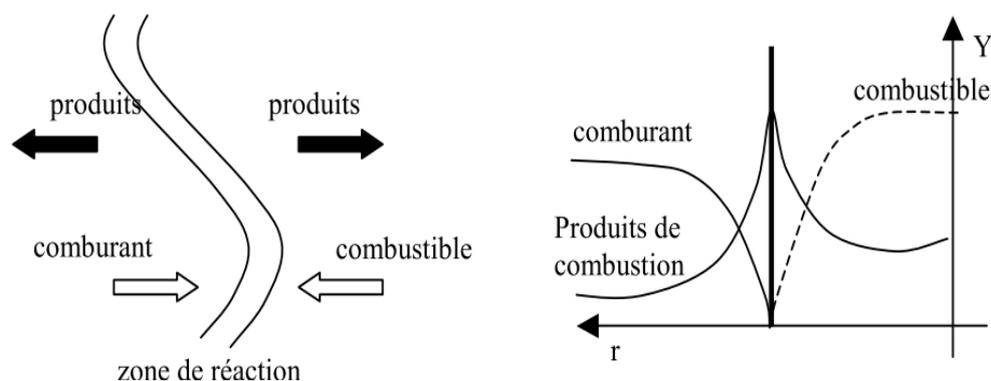


Figure 1-7 : Structure d'une flamme de diffusion [23]

La flamme de diffusion est formée de différentes zones Figure (1-8) : une zone centrale qui ne contient que du combustible, une zone de réaction et une zone de gaz chauds produits

par l'interaction fuel-comburant. Mais, en réalité, la réaction ne se déroule pas uniquement le long de la ligne stœchiométrique, mais également dans la zone d'inflammabilité de chaque côté de cette ligne dont la combustion dans cette zone est incomplète, et la flamme de diffusion produit des suies provenant des molécules de carbone (pour le cas des hydrocarbures). Par conséquent, les flammes de diffusion ou encore dites non-prémélangées sont caractérisées par un panache jaunâtre causé par le rayonnement des suies (Figure 1-6) [23].

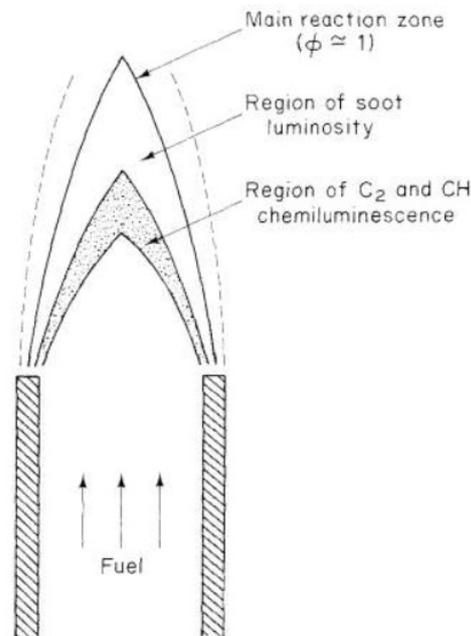


Figure 1-8 : Flamme de diffusion (CaltechAUTHORS) [24]

Bien que dans le cas des flammes de diffusion, le combustible et le comburant (l'air dans les plus part des cas) entrent sous forme des flux séparés, ensuite ils sont diffusés ensemble en réagissant dans une région étroite figure (1-8).

En outre, un rapport d'équivalence est peut-être défini dans la flamme de diffusion qui, varie localement de zéro pour l'air pur et l'infini pour le combustible pur. La combustion dans un environnement confiné peut être caractérisée par un rapport d'équivalence global basé sur les débits de combustible et d'air (CaltechAUTHORS)[24].

1.3.4 Flammes prémélangées turbulentes :

La combustion prémélangée se produit lorsque les réactifs sont mélangés au niveau moléculaire avant d'entrer dans la zone de réaction. Ce mode de combustion se retrouve dans les moteurs à allumage classiques, dans de nombreux appareils électroménagers et dans les brûleurs de Bunsen. La figure (1-9) ci-après illustre une flamme de brûleur de Bunsen. La vitesse laminaire de la flamme (S_L) est la grandeur fondamentale qui décrit ce mode de combustion. Elle est définie comme la vitesse à laquelle le front de flamme se propage normalement dans les réactifs frais. Dans un brûleur ou bec Bunsen en régime permanent, la valeur absolue de cette vitesse de flamme laminaire correspond à la vitesse d'écoulement normale au front de flamme du mélange imbrûlé. À l'intérieur du front de flamme prémélangé, le combustible sont complètement consommés et les espèces résultantes sont définitivement transformées en produits plus stables[25].

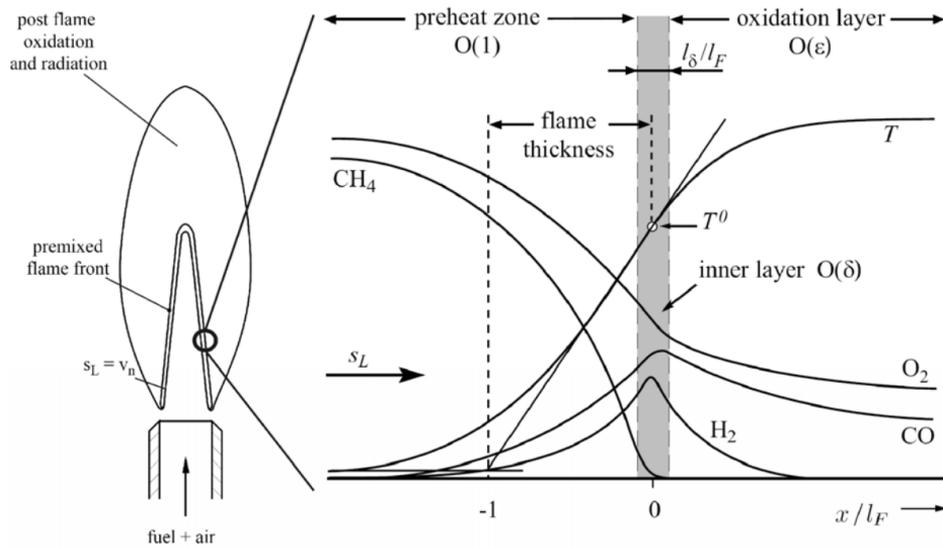


Figure 1-9 : Bruleur de Bunsen[25]

A partir de la structure de la flamme prémélangée décrite ci-dessus, deux échelles de longueur caractéristiques importantes peuvent être extrapolées.

La taille de l'ensemble de la structure de la flamme laminaire dont l'épaisseur de la flamme (l_F), peut être exprimé en fonction de la taille de la zone de préchauffage, définie comme suit :

$$l_F = \frac{T^0}{(\partial T / \partial x)^0} = \frac{(\lambda / c_p)^0}{\rho S_L} \quad (1-10)$$

L'exposant ⁰ désigne ici les quantités évaluées à la température de la couche intérieure (T^0). En outre, l'épaisseur de la couche interne l_δ peut être calculée à partir de l'épaisseur de la flamme l_F selon la relation suivante :

$$l_\delta = \delta l_F \quad (1-11)$$

Où δ représente l'épaisseur d'une flamme stœchiométrique laminaire de méthane et d'air à la pression ambiante à (0,1) de sa longueur[25].

En effet, pour induire des turbulences, une grille génératrice qui doit provoquer des aspérités dans les filets fluides, dont. Elle est placée en amont du bord de la flamme, par conséquent, un écoulement turbulent est établi en atteignant des nombres de Reynolds supérieurs à 2300 [9][10][16].

En outre, la turbulence peut être définie sur des d'échelles spécifiques. Il s'agit des échelles plus grandes appelées échelles intégrales et des échelles plus petites dont l'énergie turbulente se dissipe, appelées échelle de Kolmogorov. Pour évaluer ces phénomènes, deux nombres adimensionnels sont utilisés ; le nombre de Karlovitz et le nombre de Damköhler[26][27].

Le nombre de Damköhler (Da), tel que défini dans les équations 1-9, peut être exprimé à aussi à l'aide de la formule ci-dessous :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l/u'}{\delta/S_t} \quad (1-12)$$

L'équation (1-12) indique que lorsque le nombre de Damköhler (Da) est assez grand devant 1 ($Da \gg 1$) signifie que les réactions chimiques sont infiniment rapides par rapport aux effets de la turbulence (temps de réaction chimique \ll temps de turbulence), dans ce cas, la turbulence n'influe pas le front de la flamme[28].

À l'inverse, lorsque le nombre de Damköhler est inférieur à 1 ($Da < 1$), il s'agit d'un régime de réactions distribuées, où les réactions chimiques sont étalées. En revanche, une valeur intermédiaire du nombre de Damköhler suggère la présence du régime de flammelette, caractérisé par des flammes en phase tourbillonnaire[27].

En défini e nombre de Karlovitz (Ka) comme le rapport entre l'échelle de temps chimique (τ_c) et l'échelle de temps de Kolmogorov (τ_η) et est exprimé comme suit :

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L}{v_L} \left(\frac{v}{\varepsilon}\right)^{-0.5} \quad (1-13)$$

Dont ;

δ_L : épaisseur de la flamme en régime laminaire.

v : viscosité cinématique du mélange.

ε : énergie de dissipation.

v_L : vitesse de propagation du front de flamme en régime laminaire, avec :

$$v_L = \sqrt{\frac{\alpha}{\tau}} \quad (1-14)$$

α : diffusivité thermique.

τ : temps de réaction chimique.

La figure 1-10 ci-après représente de diagramme de Borghi pour les différents cas de flammes en fonction de nombre de DamKöhler, Karlovich et Reynolds[10][16].

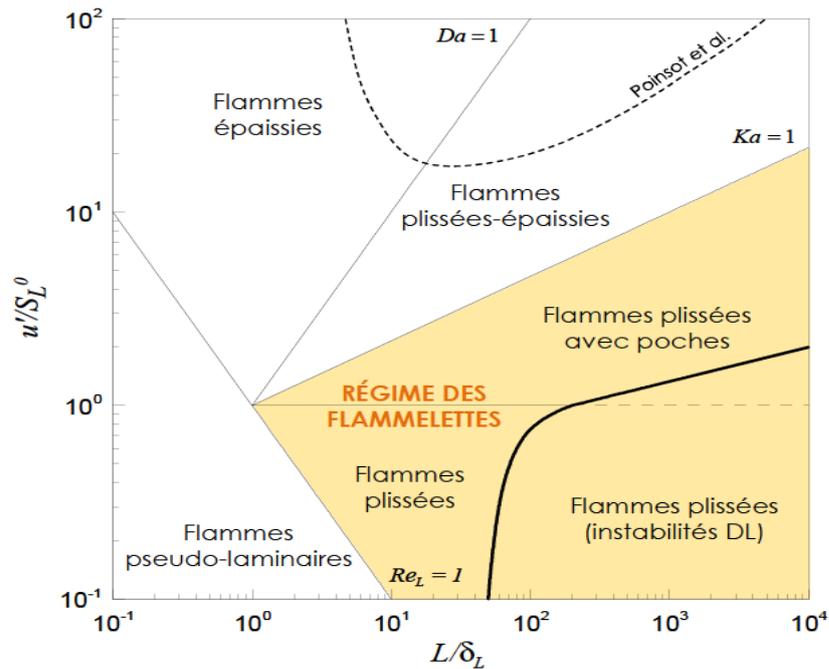


Figure 1-10 : Diagramme de Borghi pour la classification des flammes turbulente[28][29].

1.3.5 Flammes de diffusion turbulentes

Les flammes turbulentes non-prémélangées sont présentes dans de nombreux systèmes industriels pour deux raisons principales.

- 1- Les brûleurs non prémélangés sont plus simples à concevoir et à construire par rapport aux ceux pour les flammes prémélangés.
- 2- Les flammes non-prémélangées sont également plus sûres à utiliser car elles ne présentent pas de vitesse de propagation et ne peuvent pas provoquer de retour de flamme ou d'autogenèse dans des endroits non désirés.

Bien qu'il soit important de signaler que la plupart des paramètres qui servent à décrire les flammes prémélangées tels que les verticités générées par la flamme, effets visqueux ou étirement sont aussi sert pour dériver les flammes non-prémélangées. En contrepartie, dans les applications industrielles, la modélisation des flammes turbulentes non-prémélangées est un défi très courant pour les codes de calcul. Cependant, des processus spécifiques rendent les flammes non-prémélangées plus difficiles à comprendre et à décrire [7].

1.3.5.1 Structure typique d'une flamme de diffusion turbulente

Un exemple typique de flamme turbulente non-prémélangée est illustré dans la figure (1-11), dont, le champ de température est calculé par la technique (LES). Il s'agit de la fameuse flamme l'on appelle '*Sandia D flame*' pour un jet de méthane et d'air.[30]

Cette flamme présente les caractéristiques habituelles des flammes de diffusion. Dont, on constate les observations suivantes :

- une zone initiale près de l'orifice d'injection où la flamme est mince.
- une région en aval où les gaz brûlés occupent une grande partie du domaine.

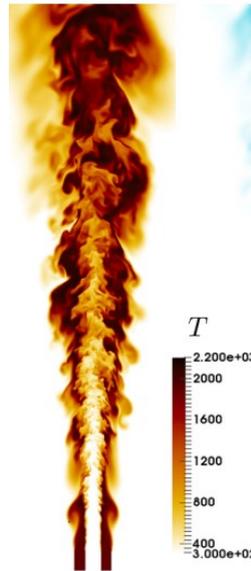


Figure 1-11 : Flamme de diffusion turbulente (Sandia D)[30]

1.3.5.2 Caractéristiques spécifiques aux flammes non-prémélangées turbulentes

Les flammes non-prémélangées turbulentes présentent quelques caractéristiques spécifiques qui doivent être prises en compte et qui peuvent entraîner des difficultés supplémentaires dans la modélisation de la combustion. Par la suite citant les suivantes [7]:

- 1- Les flammes non-prémélangées ne se propagent pas : elles se situent à l'endroit où le combustible et le comburant se rencontrent ; Cette propriété est utile pour des raisons de sécurité, mais elle a également des conséquences sur la turbulence de l'interaction chimie/interaction : sans vitesse de propagation, une flamme non-prémélangée est incapable d'imposer sa propre dynamique au champ d'écoulement et est plus sensible à la turbulence.
- 2- Les flammes de diffusion sont également plus sensibles à l'étirement que les flammes prémélangées turbulentes.
- 3- Les valeurs critiques d'étirement pour l'extinction des flammes de diffusion sont inférieures d'un ordre de grandeur à celles des flammes de prémélange.
- 4- Une flamme de diffusion est plus susceptible d'être éteinte par des fluctuations turbulentes et les hypothèses de flammelette ne sont pas justifiées.

1.4 Conclusion

La combustion est un processus fondamental qui a été utilisé depuis des millénaires pour produire de l'énergie dans notre société. La civilisation a fait des progrès considérables dans ce domaine, passant de la combustion de bois et du charbon à celle de combustibles fossiles tels que le pétrole et le gaz naturel.

Cependant, l'utilisation de combustibles fossiles a entraîné une augmentation des émissions de gaz à effet de serre et de polluants atmosphériques, contribuant à la pollution de l'air et au changement climatique. Les recherches sur les flammes sont donc essentielles pour trouver des solutions technologiques qui permettent de produire de l'énergie propre.

Les flammes sont le résultat de la combustion, un processus chimique complexe impliquant la réaction d'un combustible avec un oxydant. Les recherches sur les flammes ont permis de comprendre les mécanismes qui régissent ce processus, ce qui a permis de développer des technologies plus efficaces et respectueuses à l'environnement.

En conséquence, de nombreuses firmes industries travaillent sur des technologies de combustion plus propres, telles que les moteurs à faible émission, les turbines à gaz plus efficaces et les combustibles alternatifs tels que les biocarburants et les combustibles synthétiques. Ces technologies ont le potentiel de réduire considérablement les émissions de gaz à effet de serre et de polluants atmosphériques, tout en permettant à la civilisation de continuer à utiliser la combustion comme source d'énergie.

En outre, il est important de signaler que les recherches sur les flammes ne se limitent pas à la réduction des émissions atmosphériques. Les flammes sont également utilisées dans une variété de technologies, telles que la propulsion des avions et des fusées, la production de métaux et la combustion industrielle. Comprendre les mécanismes des flammes peut donc aider à améliorer l'efficacité et la sécurité de ces technologies.

Chapitre 2: Variables caractéristiques de la combustion

2.1 Introduction

Les écoulements réactifs turbulents comprennent un large éventail de processus, qui peuvent être classés en quatre catégories distinctes : thermodynamique, cinétique chimique, mécanique des fluides et processus de transport [25].

L'objectif de ce chapitre est de présenter un résumé succinct des principes et des formules qui contrôlent les phénomènes de combustion turbulente. Les équations de conservation considérées ne possèdent pas de solution analytique reconnue. En outre, en raison des contraintes imposées par les capacités de calcul actuelles, les équations de bilan ont subi un processus de moyennisation conformément à des lois établies. Ces lois seront décrites dans ce chapitre, tout en présentant un résumé exhaustif des différents modèles de turbulence actuellement disponibles.

2.2 Variables pour la caractérisation des flux réactifs

Le processus de combustion implique l'interaction de plusieurs espèces chimiques par le biais de nombreuses réactions chimiques dont. Ils aussi régies par les lois de dynamique des fluides. Dans des situations multi-espèces et multi-réactions comme dans la combustion, il est important d'introduire d'autres termes supplémentaires afin de caractériser les mélanges, il est aussi nécessaire d'utiliser des variables qui délimitent les différents pourcentages de réactifs et l'évolution des réactions chimiques.

2.2.1 Fraction massique Y

La fraction massique Y peut être utilisée pour décrire la distribution des espèces dans un mélange. Sa définition est la suivante :

$$\begin{cases} Y_k = \frac{m_k}{m_{tot}} \\ \sum_{k=1}^N Y_k = 1 \end{cases} \quad (2-1)$$

N : est le nombre des espèces dans un volume V du gaz considéré

m_{tot} : la masse molaire totale du gaz.

m_k :masse molaire de l'espèce k

2.2.2 Fraction molaire X

La fraction molaire X peut être utilisée pour décrire la distribution des espèces dans un mélange. Sa définition est la suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} X_k = \frac{n_k}{n_{tot}} \\ \sum_{k=1}^N X_k = 1 \end{array} \right. ; \begin{array}{l} n_k : \text{nombre de moles pour l'espèce k} \\ n_{tot} : \text{nombre de moles total} \end{array} \quad (2-2)$$

2.2.3 Facteurs stœchiométriques

Dans le contexte de la combustion, il est plus commode d'établir une relation entre les fractions de masse des réactifs et les fractions de masse des mêmes réactifs dans les conditions stœchiométriques.

Une réaction stœchiométrique peut être définie comme une réaction unique dans laquelle tous les réactifs (combustible et oxydant) sont consommés et les produits sont dans leurs états les plus stables. La formule suivante décrit une réaction stœchiométrique d'un combustible quelconque :



Où les coefficients stœchiométriques v'_k ($k = \{F, O_2, CO_2, H_2O\}$) sont les suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} v'_F = 1 \\ v'_{O_2} = v'_O = m + \frac{n}{4} \\ v''_{CO_2} = m \\ v''_{H_2O} = \frac{n}{2} \end{array} \right. \quad (2-4)$$

Le coefficient stœchiométrique du carburant peut être choisi arbitrairement à l'unité et v'_O correspond au coefficient stœchiométrique de l'oxydant qui n'est pas forcément l'oxygène.

L'équation (2-5) définit le rapport stœchiométrique s ; c'est la plus petite quantité d'oxydant nécessaire pour brûler complètement une unité de masse du fuel :

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st} = \frac{v'_O W_O}{v'_F W_F} \quad (2-5)$$

Avec W_k est la masse molaire d'espèce k.

Bien qu'un rapport réel d'oxydant et carburant dans un mélange en réaction peut être reliée au rapport de masse stœchiométrique dans la relation suivante :

$$\lambda = \frac{\left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)}{\left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st}} = \frac{1}{s} \frac{Y_O}{Y_F} \quad (2-6)$$

λ ; c'est le rapport d'excès d'air dont il est couramment utilisé pour comparer le comportement des différentes flammes

On définit aussi un autre paramètre, c'est le rapport d'équivalence ϕ qui est l'inverse du rapport λ défini précédemment, alors ϕ est défini comme suit :

$$\phi = \frac{\left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)}{\left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st}} = \frac{1}{\lambda} \quad (2-7)$$

λ et ϕ sont des variables comprises entre zéro et l'infini. En utilisant ces paramètres, il est possible de classer tout mélange réactif en trois catégories :

- Mélange pauvre en carburant : $1 < \lambda < \infty$ ou $0 < \phi < 1$
- Mélange stœchiométrique : $\lambda = 1$ ou $\phi = 1$
- Mélange à défaut d'air : $0 < \lambda < 1$ ou $1 < \phi < \infty$

2.2.4 Fraction de mélange Z

La fraction de mélange Z (parfois représentée par f ou ξ) est une mesure essentielle pour décrire la combustion non-prémélangée. Dans ce type de combustion, le mélange au niveau moléculaire entre les réactifs doit précéder les réactions chimiques. Généralement, le temps nécessaire à la convection et à la diffusion, dépasse le temps nécessaire à la réaction de combustion pour épuiser totalement le combustible. Dont, le mélange devient l'étape la plus importante dans les flammes de diffusion, où l'hypothèse d'une chimie rapide se vérifie. Par conséquent, l'introduction d'une variable « scalaire conservée » indépendante de la chimie pour décrire les processus de mélange est d'une importance capitale pour prédire les flammes non-prémélangées d'une façon plus précise. Diverses définitions peuvent être proposées pour calculer la fraction de mélange dans la combustion, les plus significatives, selon l'auteur, étant présentées ici. Des développements supplémentaires sur l'approche du scalaire conservé sont disponibles dans [29].

Dans de nombreux cas pratiques, les réactions chimiques se produisent rapidement dès que les réactifs sont mélangés. Pour étudier ce processus, une méthode courante consiste à utiliser un scalaire conservé pour caractériser le mélange. L'hypothèse de chimie rapide suppose que les concentrations des espèces moléculaires et la température dépendent uniquement du scalaire conservé à un instant donné. La non-linéarité des fonctions pose un défi pour relier les moyennes et les moments supérieurs des espèces et de la température avec ceux du scalaire conservé. Cela nécessite de prendre en compte l'ensemble de la fonction de densité de probabilité (PDF) du scalaire conservé [31].

La propriété du scalaire conservé β est une caractéristique du fluide qui ne change pas au cours des processus physiques ou chimiques, dont, la quantité représentée par β reste constante et ne subit pas de transformations pour les réactifs (création ou de destruction) lors des différentes transformations du mélange. Elle peut être normalisée en le divisant par ses valeurs minimale et maximale, ce qui donne la valeur de la fraction de mélange donnée par :

$$Z = \frac{\beta - \beta_{\min}}{\beta_{\max} - \beta_{\min}} = \frac{Y_f - Y_{f\infty}}{Y_{f0} - Y_{f\infty}} \quad (2-8)$$

Avec :

$Y_{f\infty}$: fraction massique du fuel dans l'oxydant pur (généralement nul).

Y_{f0} : fraction massique du fuel à la sortie du fuel.

Y_f : fraction massique du fuel dans le point considéré.

La détermination de la fraction de mélange peut être obtenue de manière intuitive à partir de l'équation (2-3) pour les systèmes homogènes ou hétérogènes avec des diffusivités égales pour toutes les espèces. Dont, l'équation de réaction (2-3) établit une relation entre les variations des fractions massiques de l'oxygène et du carburant.

$$\frac{dY_{O_2}}{\dot{v}_{O_2} W_{O_2}} = \frac{dY_F}{\dot{v}_F W_F} \quad (2-9)$$

L'intégration de la relation (2-9) peut se faire à partir de l'état imbrûlé, désigné par l'indice u , jusqu'à un état intermédiaire qui se produit au cours de la réaction. En incorporant le résultat de l'intégration à la définition du rapport massique stœchiométrique s (tel qu'exprimé dans l'équation (2-5)), la relation suivante est établie :

$$sY_F - Y_{O_2} = sY_{F,u} - Y_{O_2,u} \quad (2-10)$$

L'équation (2-10) établit la variable de couplage de [32], qui est un scalaire conservé, en considérant l'état de combustion intermédiaire arbitraire et l'état non brûlé conservé.[32][33][34]

$$Sc_c = sY_F - Y_{O_2} \quad (2-11)$$

En outre, selon [33]. Dans le cas où la variable de couplage de Shvab-Zel'dovich [10], la fraction de mélange Z subit la transformation suivante :

$$Z = \frac{sY_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,2}}{Y_{F,1} + Y_{O_2,2}} \quad (2-12)$$

Dont les indices 1 et 2 indiquent les entrées du fuel et de l'oxydant respectivement.

Pour un mélange stœchiométrique, la relation $sY_F = Y_{O_2}$ est valable dont la fraction de mélange stœchiométrique peut être facilement déduite de l'équation (2-12) :

$$Z_{st} = \frac{1}{1 + sY_{F,1}/Y_{O_2,2}} \quad (2-13)$$

Le tableau suivant donne quelques exemples de la fraction de mélange stœchiométrique Z_{st} pour quelques carburant.[25]

Carburant	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₄	C ₃ H ₈	C ₂ H ₂
Z	0.0284	0.055	0.0635	0.0601	0.072

Table 2-1 : Fraction de mélange stœchiométrique Z pour quelques carburant

Une approche alternative pour caractériser la fraction de mélange consiste à établir un lien avec les éléments chimiques, plutôt que de s'appuyer sur le rapport d'équivalence. Dans les systèmes chimiques qui subissent des réactions, les espèces chimiques sont consommées ou générées, tandis que la fraction de masse des éléments reste conservée, même dans le contexte de la combustion. En désignant par a_{kj} la quantité d'atomes de l'élément j présents dans une molécule de l'espèce k, et par W_j le poids moléculaire de cet élément, il est possible d'exprimer la fraction massique de l'élément j comme suit :

$$Z_j = \frac{m_j}{m} = \sum_{k=1}^N \frac{a_{kj}W_j}{W_k} Y_k \quad (2-14)$$

L'étude menée par Ferreira [35] a utilisé les fractions de masse des éléments combustibles comme scalaire conservé pour caractériser la fraction de mélange. Cela signifie que dans le cas d'un carburant composé uniquement d'hydrocarbures, la fraction massique de l'élément combustible est égale aux fractions massiques combinées du carbone et de l'hydrogène.

Bilger [36] a proposé une relation qui est souvent utilisée pour déterminer les valeurs des fractions de mélange sur la base de données expérimentales ou numériques. Le couplage des fractions massiques du carbone (C), de l'hydrogène (H) et de l'oxygène (O) est observé dans le scalaire conservateur décrit par cette définition.

$$s_{cc} = \frac{Z_C}{mW_C} + \frac{Z_H}{nW_H} - 2 \frac{Z_O}{\dot{v}_{O_2} W_{O_2}} \quad (2-15)$$

Par substitution de (2-15) dans (2-12) :

$$0 \leq Z = \frac{\left(\frac{Z_C}{mW_C} \right) + \left(\frac{Z_H}{nW_H} \right) + 2 \left(\frac{Y_{O_2,2} - Z_O}{\dot{v}_{O_2} W_{O_2}} \right)}{\left(\frac{Z_{C,1}}{mW_C} \right) + \left(\frac{Z_{H,1}}{nW_H} \right) + 2 \left(\frac{Y_{O_2,2}}{\dot{v}_{O_2} W_{O_2}} \right)} \leq 1 \quad (2-16)$$

2.3 Nombres adimensionnels souvent utilisés dans la combustion

I. Nombre de Reynolds :

C'est un paramètre sans dimension utilisé en mécanique des fluides pour caractériser le régime d'écoulement d'un fluide autour d'un objet ou à travers un conduit. Il est défini comme le rapport entre les forces inertielles et les forces visqueuses qui agissent sur le fluide. Mathématiquement, le nombre de Reynolds (Re) est donné par le produit du rapport entre la vitesse caractéristique du fluide et une dimension caractéristique de l'écoulement, divisé par la viscosité cinématique du fluide. Le nombre de Reynolds permet de distinguer les différents régimes d'écoulement, tels que l'écoulement laminaire ($Re < 2000$), l'écoulement de transition ($2000 < Re < 4000$) et l'écoulement turbulent ($Re > 4000$).

$$Re = \frac{U \cdot D}{\nu} = \frac{\rho \cdot U \cdot D}{\mu} \quad (2-17)$$

II. Nombre de Prandtl :

En mécanique des fluides, le nombre de Prandtl, (Pr), est un nombre sans dimension utilisé pour décrire le transfert de chaleur dans un fluide. Il indique dans quelle mesure la diffusivité cinématique d'un fluide est supérieure à sa diffusivité thermique.

En outre, Le nombre de Prandtl est utilisé pour caractériser la conduction thermique dans un fluide par rapport au taux de diffusion de la quantité de mouvement. Un nombre de Prandtl élevé signifie la prédominance de la conduction thermique par rapport à la convection, tandis qu'un nombre de Prandtl faible signifie la plus grande importance de la convection dans le transfert de chaleur.

Il est décrit mathématiquement c'est le rapport entre viscosité cinématique du fluide et sa conductivité thermique, ci-joint sa formulation mathématique :

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} = \frac{\mu}{\rho \cdot \alpha} \quad (2-18)$$

III. Nombre de Lewis :

Le nombre de Lewis, symbolisé par Le , est une quantité adimensionnelle utilisée dans le domaine de la combustion et du transfert de chaleur pour caractériser l'importance relative de la diffusivité moléculaire d'une espèce particulière par rapport à la conductivité thermique dans un milieu fluide. Il s'agit du quotient de la diffusivité thermique (α) divisée par la diffusivité d'une substance spécifique dénotée par (D).

$$Le = \frac{\alpha}{D} \quad (2-19)$$

En outre, Le nombre de Lewis est utilisé pour caractériser le rapport entre les taux de transfert d'énergie thermique et de masse dans un écoulement de fluide. On indique que, lorsque le nombre de Lewis est supérieur à un, cela signifie que le taux de transfert de chaleur est plus élevé que le taux de diffusion des espèces. Inversement, lorsque le nombre de Lewis est inférieur

à un, il indique que la diffusion des espèces est le processus dominant par rapport au transfert de chaleur.

IV. Nombre de Schmidt :

Le nombre de Schmidt Sc est une quantité adimensionnelle qui représente le rapport entre la diffusivité de la quantité de mouvement (viscosité cinématique) et la diffusivité de la masse d'un fluide. Elle sert à décrire les écoulements de fluides qui impliquent des processus simultanés de convection de diffusion de la quantité de mouvement et de la masse. Bien que ce nombre puisse être défini comme le rapport de la composante de cisaillement pour la diffusivité, qui est obtenue en divisant la viscosité par la densité, et la diffusivité pour le transfert de masse, désignée par \bar{D} . Ce phénomène établit un lien physique entre l'épaisseur relative de la couche hydrodynamique et de la couche limite de transfert de masse [4].

Le nombre de Schmidt est défini par la formule mathématique suivante :

$$Sc = \frac{\nu}{\bar{D}} = \frac{\mu}{\rho \cdot \bar{D}} \quad (2-20)$$

V. Nombre de Damköhler :

Nous avons déjà vu le nombre de Damköhler et de Karlovitz plus loin dans le chapitre 1, comme nous avons déjà vu son utilité dans la combustion. Dans cette définition nous allons donner d'autres formulations mathématiques pour ce nombre mais nous avons aussi le redéfinir.

Le nombre de Damköhler (Da) est un nombre non dimensionnel utilisé dans le domaine de la combustion. Il s'agit d'un rapport entre l'échelle de temps des réactions chimiques (vitesse de réaction) et la vitesse des phénomènes de transport qui ont lieu dans un écoulement réactif [4].

$$Da = \frac{\tau_f}{\tau_c} \quad (2-21)$$

La corrélation entre la vitesse de réaction et l'échelle de temps est très importante dans l'analyse des processus chimiques. La formulation des règles de vitesse est basée sur des équations spécifiques utilisées pour décrire les processus chimiques. Pour les réactions chimiques générales de type $A \rightarrow B$ suivant la cinétique de la loi de puissance n , le nombre de Damköhler se trouve dans les systèmes d'écoulement par convection. Voici une représentation mathématique alternative du nombre de Damköhler [4]:

$$Da = \frac{k \cdot C_0^{(n-1)} \cdot a}{k_g} \quad (2-22)$$

Avec ;

k : Constante de vitesse de réaction

C_0 : Concentration initiale

$(n-1)$: Ordre de la réaction

a : Aire d'interface

k_g : Constante globale de transfert de masse

VI. *Nombre de Karlovitz :*

Le nombre de Karlovitz quantifie l'interaction entre les échelles temporelles du mélange turbulent et des réactions chimiques dans un système physique. Un nombre de Karlovitz élevé signifie la prédominance des processus de combustion, tandis qu'un nombre de Karlovitz faible signifie la prédominance des processus de mélange turbulent. Il est donné par la formule suivante [37]:

$$Ka = \frac{\tau_L}{\tau_K} = \frac{\delta_L}{\nu_L} \left(\sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} \right) \quad (2-23)$$

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons analysé un ensemble de variables couramment employées pour caractériser les écoulements réactifs, en particulier les flammes et les phénomènes de combustion. Ces variables jouent un rôle central dans la description de ces processus et ont été introduites dans le but d'approfondir notre compréhension des mécanismes physiques et chimiques sous-jacents aux flammes. La maîtrise de ces concepts est déterminant pour de nombreuses applications dans le domaine de la combustion.

Chapitre 3: Equations gouvernantes pour les écoulements turbulents réactifs

3.1 Introduction

La représentation mathématique du comportement dynamique des mélanges en réaction implique un ensemble d'équations de conservation qui tiennent compte de la masse, des espèces, de la quantité de mouvement et de l'énergie. L'équation de conservation de la masse reste inchangée à la fois dans les mélanges qui ne réagissent pas et dans ceux qui réagissent, en raison de la préservation de la masse au cours des processus de combustion. L'utilisation de la convention de sommation d'Einstein permet de représenter l'expression en coordonnées cartésiennes.

3.2 Equations instantanées de base régissant les écoulements turbulents réactifs

3.2.1 Equation de continuité

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3-1)$$

3.2.2 Equation de conservation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} \quad (3-2)$$

Où, τ_{ij} désigne le tenseur des forces visqueuses et $f_{k,j}$ représente la force volumique exercée sur l'espèce k dans la direction j . Comme nous analyserons dans ce travail des flammes avec une quantité de mouvement relativement élevée, l'effet de la gravité peut être négligé et l'équation (3-2) prend la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = - \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (3-3)$$

Le tenseur des forces visqueuses est donné par :

$$\tau_{ij} = \mu_{eff} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (3-4)$$

Où μ est la viscosité dynamique et δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Bien que l'équation (3-4) n'inclue pas explicitement aucun terme de combustion, le comportement de l'écoulement est significativement influencé par les réactions chimiques.

L'énergie thermique libérée le long du front de flamme entraîne des changements significatifs de la viscosité dynamique μ , de la densité ρ et, par conséquent, de la vitesse u_i par rapport aux écoulements non réactifs.

3.2.3 Equation de conservation de la fraction massique

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad \text{pour } k=1, \dots, N \quad (3-5)$$

Où D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange et $\dot{\omega}_k$ le taux de production de cet l'espèce.

3.2.4 Equation de conservation de l'énergie

Le bilan d'énergie conduit à l'équation pour l'enthalpie massique suivante :

$$\rho \frac{dh_s}{dt} = \dot{\omega}_T + \frac{dp}{dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} \quad (3-6)$$

Où \dot{Q} est le terme source de chaleur et $\dot{\omega}_T$ est le dégagement de chaleur dû à la combustion.

L'enthalpie sensible $h_{s,k}$, produite par la réaction chimique, est donnée par :

$$h_s = h - \left(\sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^\circ Y_k \right) \quad (3-7)$$

3.2.5 Equation des gaz parfaits

On va considérer ces gaz comme des mélanges parfaits de gaz parfait :

$$p = \rho \frac{R}{\bar{W}} T \quad (3-8)$$

Dont $R = 8.314 \frac{J}{mol \cdot K}$ est la constante des gaz parfaits et \bar{W} est la masse molaire moyenne du mélange qui est donnée par la formule suivante :

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (3-9)$$

W_k est la masse molaire de l'espèce k , Y_k est la fraction massique de l'espèce k .

3.3 Moyennement des équations gouvernantes :

3.3.1 Nécessité de moyennement

Les variables caractéristiques de l'écoulement se comportent d'une manière à la fois fluctuante et a priori désordonnée, ce qui est marque la nature turbulente de l'écoulement. En raison de l'importance des maillages nécessaires, il est difficile de résoudre directement les

équations gouvernantes (3-1), (3-2), (3-5) et (3-6) pour des écoulements à des échelles infiniment petites. Bien qu'elles soient toujours utilisées pour décrire le mouvement des fluides, les équations de Navier-Stokes nécessitent beaucoup de temps de calcul et de mémoire pour être résolues directement. Pour le cas d'un écoulement dans une conduite avec un nombre de Reynolds de 10^5 , le nombre de points nécessaires est de l'ordre 10^9 . C'est pourquoi il est parfois important de limiter la quantité de données à traiter, par exemple en calculant uniquement le champ moyen. Les variables d'état sont alors considérées comme des fonctions aléatoires dans le temps et l'espace, et sont séparées en une composante fluctuante modélisée et une composante moyenne estimée. La décomposition de Reynolds est le nom de cette méthode. Nous pouvons dériver les équations caractéristiques du comportement d'un fluide dans un écoulement turbulent en appliquant cette décomposition aux équations d'équilibre précédentes. Comme les équations de Navier-Stokes ne sont pas linéaires, des facteurs supplémentaires, connus sous le nom de corrélations, doivent être inclus dans le modèle [38] [39].

En outre, on signale que la solution numérique des équations gouvernantes d'écoulements est limitée à des situations relativement simples avec un petit nombre d'échelles de temps et de longueur dans l'écoulement. Pour résoudre ce problème, une étape supplémentaire est ajoutée en calculant la moyenne des équations d'équilibre pour décrire uniquement le champ d'écoulement moyen (les fluctuations locales et les structures turbulentes sont incorporées dans les valeurs moyennes et n'ont plus besoin d'être prises en compte dans la simulation). Chaque quantité φ est divisée en une moyenne $\bar{\varphi}$ et un écart par rapport à la moyenne φ' .

La relation (3-10) quantifie théoriquement une quantité chaotique liée à la turbulence. Cette relation nous aide à comprendre les écoulements turbulents en les modélisant quantitativement [25].

$$\begin{cases} \varphi = \bar{\varphi} + \varphi' \\ \bar{\varphi}' = 0 \end{cases} \quad (3-10)$$

Où φ désigne la composante scalaire ou vectorielle d'une variable de débit. φ' représente la composante fluctuante et $\bar{\varphi}$ représente une quantité moyennée dans le temps décrite par la relation suivante :

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} \varphi dt \quad (3-11)$$

La composante fluctuante φ' indique un mouvement turbulent dans la décomposition (3-18), également connue sous le nom de décomposition de Reynolds de la variable d'écoulement φ .

Les équations moyennées peuvent être obtenues en plaçant l'équation (3-11) avec les variables requises dans les équations de bilan instantanées qui ont été discutées précédemment. Cela nous permettra de calculer les quantités moyennées. Les équations de Navier-Stokes moyennées ou encore dites équations de Reynolds (RANS) sont des noms typiques pour les équations moyennées.

Le processus de moyennage des équations instantanées réduit considérablement la résolution numérique dans les études de turbulence et introduit des termes non résolus. Si le

calcul de la moyenne de Reynolds est particulièrement adapté aux écoulements incompressibles, il se pose des problèmes avec les écoulements qui présentent des variations de densité importantes, tels que les écoulements compressibles ou réactifs. Ces types d'écoulements posent des problèmes car le processus de calcul de la moyenne de Reynolds génère de nombreuses corrélations non résolues en raison de ces variations de densité [40] [41].

En conséquence, les moyennes pondérées par la masse, également connues sous le nom de moyennes de Favre, sont souvent privilégiées dans le domaine de la combustion. Elles permettent de tenir compte d'une façon plus précise les variations de densité et des fluctuations qui y sont liées, ce qui est essentiel pour une modélisation plus fiable pour le cas des écoulements réactifs [25] [41] [42]. Elle est définie par l'équation (3-12) ci-après :

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho\varphi}}{\rho} \quad (3-12)$$

Où $\tilde{\varphi}$ désigne une masse ou une quantité moyennée de Favre. Là encore, la variable locale instantanée φ peut être divisée en moyenne de Favre et en sa partie fluctuante ;

$$\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi'' \quad (3-13)$$

Où φ'' correspond à une fluctuation ou oscillation aléatoire autour de la moyenne de masse. On signale ici qu'il n'existe pas de relation directe entre les moyennes de Favre $\tilde{\varphi}$ et celle de Reynolds $\bar{\varphi}$.

En revanche, l'équation (3-14) montre que pour avoir une relation entre les deux quantités nécessite la connaissance des corrélations des fluctuations de densité, $\rho'\varphi'$ qui restent cachées dans les quantités moyennées de Favre :

$$\tilde{\varphi} = \bar{\varphi} + \frac{\overline{\rho'\varphi'}}{\rho} \quad (3-14)$$

Naturellement, si ρ' et φ' sont peu liés, la différence entre les quantités moyennées par Reynolds et celle de Favre devient insignifiante. Cela est particulièrement vrai pour les écoulements incompressibles, lorsque les deux méthodes de calcul de la moyenne donnent des résultats identiques [25].

En utilisant la technique de moyenne de Favre pour calculer la moyenne des variables de débit, les équations de bilan instantané (3-1) (3-2) (3-5) (3-6) et (3-8) deviennent :

i/Equation des gaz parfaits :

$$\bar{p} = \bar{\rho}r\bar{T} \quad (3-15)$$

ii/ quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}u_i u_j = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho}u_i''u_j'' \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \quad (3-16)$$

iii/ Equation de continuité :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3-17)$$

iv/ Equation de conservation de masse :

$$\frac{\partial \bar{\rho} Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \bar{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \bar{\rho} u_i'' Y_k'' \right) + \bar{\omega}_k \quad (3-18)$$

v/ Equation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h} - \bar{p}) + \frac{\partial \bar{\rho} u_i h}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\lambda} \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \bar{\rho} \bar{D}_k h \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \bar{\rho} u_i'' h'' \right) + \bar{q} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ij} u_i) \quad (3-19)$$

Le terme \bar{q} qui a apparu dans l'équation (3-19) représente une énergie de radiation dont elle est définie comme des différences de température entre deux corps, le rayonnement prend de l'importance et l'emporte sur les autres modes de transfert de chaleur. Dans les flammes, il fonctionne comme un dissipateur de chaleur, en particulier dans la zone post-flamme, qui se caractérise par des taux de réaction chimique réduits à des valeurs minuscules ou par la présence de suie [25].

3.3.2 Fermeture des équations

Les équations de Navier-Stokes moyennées comportent des termes non fermés. Le terme de l'équation de la quantité de mouvement est défini comme le tenseur des contraintes de Reynolds $\bar{\rho} u_i'' u_j''$. L'énergie turbulente $\bar{\rho} u_i'' h''$ et les termes de transport des espèces $\bar{\rho} u_i'' Y_k''$ sont dérivés des équations moyennées de l'énergie et de la fraction de masse, respectivement.

Le taux de production chimique moyen $\bar{\omega}_k$ généré par l'équation de la fraction massique moyennée est aussi un terme non fermé. Dans un modèle de combustion, la fermeture de ce terme est critique [38]. En outre, un terme 'ouvert' ou non fermé peut être interprété comme une information manquante ou encore des grandeurs indéterminées.

En outre, Pour résoudre ce problème, des techniques numériques peuvent être introduites. Il s'agit de la modélisation des turbulences et l'interaction turbulence-combustion. C'est alors que les calculs numériques des flammes turbulentes entrent en jeu.

De nombreuses recherches ont été menées sur le thème de la modélisation des équations moyennées, ce qui a conduit à l'élaboration d'une grande variété de modèles plus ou moins complexes. Ils peuvent être classés en fonction de l'ordre des corrélations auxquelles les hypothèses de fermeture sont appliquées.

Par conséquent, la technique de modélisation est la recherche de nouvelles équations ou relations algébriques pour fermer le système d'équations, moyennées qui doit être étayée par une validation expérimentale. Les techniques de fermeture utilisent des équations statistiques pour calculer les variations de vitesse en différents points. Par conséquent, nous distinguons

plusieurs types de modèles basés sur l'ordre des moments utilisés comme principales inconnues. C'est ainsi que l'on parle de :

- 1/ Modèles du premier ordre, qui représentent les corrélations duales en fonction du gradient du champ moyen et de la viscosité de la turbulence à l'aide de l'hypothèse de Boussinesq [43]. Les modèles algébriques (cf§. Baidwin-Lomax [44][45] et Cebeci-Smith [46]) expriment directement les corrélations, en particulier le tenseur de Reynolds $u_i''u_j''$, en fonction d'autres variables d'état, et des modèles qui impliquent des échelles de turbulence et nécessitent une ou deux équations supplémentaires. Les modèles algébriques sont peu coûteux et faciles à appliquer, mais leurs résultats ne sont pas toujours corrects et doivent être adaptés à chaque application [4][38][47].

- 2/ Les modèles du deuxième ordre sont développés en établissant des équations qui définissent les termes du tenseur des contraintes de Reynolds et du vecteur de flux de chaleur turbulente. Ces modèles permettent de prévoir la dynamique des écoulements turbulents. Ils s'accompagnent d'un coût de calcul relativement élevé mais, les avantages offerts par ces modèles peuvent ne pas être suffisamment importants pour justifier le coût. [38] [47] [48]

3.4 Représentation de la turbulence

Dans le domaine des phénomènes naturels et des activités industrielles, le comportement de la dynamique des fluides est largement régi par des flux fluctuants et turbulents. La distinction fondamentale entre un écoulement laminaire et un écoulement turbulent réside dans l'implication de diverses dimensions spatiales et temporelles dans ce dernier, ainsi que dans son instabilité dynamique et l'apparition de fluctuations imprévisibles. Par exemple, lorsque l'énergie cinétique d'un fluide visqueux franchit un certain seuil, il passe d'un état laminaire à un état turbulent, surmontant les forces de cohésion entre ses molécules. À des vitesses réduites, la viscosité moléculaire inhérente au fluide agit pour atténuer les petites perturbations, préservant ainsi sa nature laminaire ordonnée [39][49][50].

Le nombre de Reynolds Re est une méthode fréquemment employée pour différencier les écoulements laminaires des écoulements turbulents. Il représente le rapport entre les forces inertielles et visqueuses et permet de mesurer la transition d'un fluide d'un régime laminaire à un régime turbulent. Lorsque le nombre de Reynolds dépasse un seuil critique, les petites perturbations de l'écoulement deviennent instables, et leur augmentation rapide conduit à un état turbulent [29][51].

L.F. Richardson[52] résume la nature des écoulements turbulents, qui sont caractérisés par une large gamme d'échelles temporelles et spatiales. En effet, les grands tourbillons à nombre de Reynolds élevé se décomposent en tourbillons plus petits qui se décomposent à leur tour en tourbillons encore plus petits (figure 3-1(a)). Ce processus se poursuit jusqu'à ce que les forces visqueuses commencent à dominer les forces convectives et que les plus petits tourbillons soient dissipés. Ce phénomène est connu sous le nom de '*cascade d'énergie*' du mouvement turbulent et remonte à la théorie de Kolmogorov pour les turbulences homogènes et isotropes. L'énergie cinétique turbulente locale k est définie comme suit :

$$k = \frac{1}{2} \frac{\overline{u_i'' u_i''}}{\overline{\rho}} = \frac{1}{2} \overline{u_i'' u_i''} \quad (3-20)$$

En outre; Richardson et Kolmogorov[47] introduisent le concept de cascade d'énergie, telle qu'illustré à la figure 3-1, pour éclaircir le mécanisme par lequel l'énergie cinétique turbulente est transférée des grandes aux plus petites échelles. La cascade présentée illustre la progression de l'énergie dans le spectre d'ondes κ [rad/m], correspondant à une longueur d'onde $l = 2\pi / \|\kappa\|$ dont la turbulence est généralement considérée comme un ensemble de structures tourbillonnaires réparties sur une large gamme de fréquences. L'énergie est générée par des structures expansives à faible nombre d'ondes en raison de variations importantes de la vitesse. L'énergie est ensuite acheminée vers la zone d'inertie de magnitude réduite. Bien qu'en signale que les petites valeurs de κ correspondant à des tourbillons à grandes échelles.

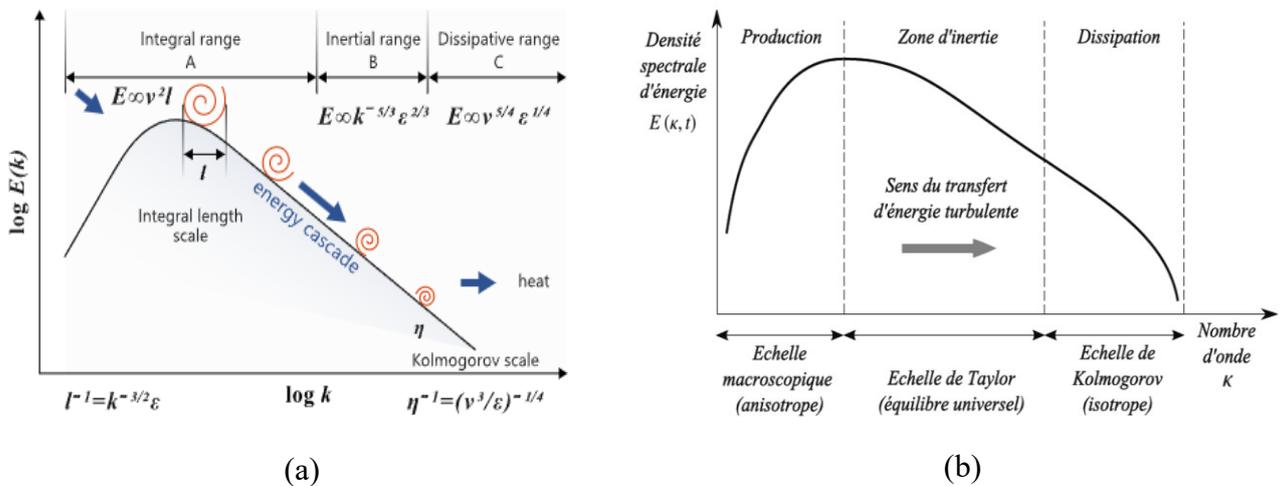


Figure 3-1 : Cascade d'énergie turbulente de Kolmogorov[47]

En outre, le taux de transfert d'énergie constant dans le domaine inertiel conduit à une pente de -5/3, dont, pour les très petits tourbillons, l'énergie par unité de nombre d'onde diminue exponentiellement en raison des effets visqueux.

Bien qu'il soit possible d'identifier deux autres échelles de longueur essentielles pour les turbulences qui limitent la zone inertielle (figure 3-1(b)), à savoir l'échelle de longueur intégrale l_i et l'échelle de longueur de Kolmogorov η qui correspond à l'échelle des plus petits tourbillons. À cette échelle de longueur, sont les forces visqueuses qui dominent en convertissant ainsi l'énergie cinétique k des plus petits tourbillons en énergie thermique. L'échelle de Kolmogorov doit donc être fonction de la viscosité cinématique ν et du taux de dissipation de l'énergie cinétique \mathcal{E} [25] [38].

Selon la théorie de Kolmogorov, la zone inertielle se distingue par un exposant de loi de puissance de $k^{-5/3}$. Le taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente \mathcal{E} peut être déterminé de l'équation suivante :

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\mathcal{E}} \right)^{1/4} \quad (3-21)$$

Le taux de dissipation \mathcal{E} peut être défini aussi comme un rapport d'énergie cinétique $u'^2(r)$ divisé par l'échelle du temps $r/u'(r)$:[47]

$$\mathcal{E} = \frac{u'^2(r)}{r/u'(r)} = \frac{u'^3(r)}{r} \quad (3-22)$$

Tout au long de la cascade, le nombre de Reynolds $Re(r)$ diminue progressivement de Re_t à des valeurs approximatives d'unité, ce qui signifie un état dans lequel les forces d'inertie et de viscosité sont en équilibre. L'échelle de Kolmogorov η , qui est influencée par la viscosité et le taux de dissipation \mathcal{E} de l'énergie cinétique turbulente k , est responsable de la détermination de la plus petite échelle présente dans un écoulement turbulent[4].

Par ailleurs, en écrivant le nombre de Reynolds $Re_\eta = 1$:

$$Re_\eta = \frac{u'\eta}{\nu} = \frac{\mathcal{E}^{1/3}\eta^{4/3}}{\nu} = 1 \quad (3-23)$$

L'échelle de longueur intégrale l_t , représente l'échelle de longueur à laquelle les tourbillons qui contiennent la plus grande quantité d'énergie.

Le rapport de l'échelle de longueur intégrale l_t , à l'échelle de longueur de Kolmogorov η est alors exprimé à partir de (3-29), (3-30) et (3-31) : [41]

$$\frac{l_t}{\eta} = \frac{u'^3/\mathcal{E}}{\left(\nu^3/\mathcal{E}\right)^{1/4}} = (Re_t)^{3/4} \quad (3-24)$$

En outre, il est possible de calculer l'échelle de temps de Kolmogorov τ_η , qui est directement liée à la durée du renouvellement d'un tourbillon de Kolmogorov.[53]

$$\tau_\eta = \sqrt{\frac{\nu}{\mathcal{E}}} \quad (3-25)$$

Par conséquent, l'échelle de longueur intégrale l_t peut être interprétée comme l'échelle de longueur à partir de laquelle les fluctuations de vitesse sont principalement indépendantes. En outre, l'échelle de temps intégrale τ_t , qui est proportionnelle au temps de renouvellement d'un tourbillon intégral, peut être définie comme suit :[25][54]

$$\tau_t = \frac{k}{\mathcal{E}} \quad (3-26)$$

3.5 Modélisation de turbulence

La simulation numérique de la turbulence est divisée en trois catégories distinctes. Par ordre croissant de précision : RANS, LES et DNS. Les modèles RANS utilisent les équations supérieures à la moyenne pour prédire les quantités moyennes d'écoulements turbulents réactifs. Le modèle DNS calcule explicitement la structure turbulente en résolvant les équations instantanées de Navier-Stokes.

La précision du modèle LES se situe entre celle de la RANS et celle de la DNS, où seuls les grands tourbillons sont explicitement visualisés. La figure 2-2 illustre les trois principales méthodologies employées dans le domaine de la mécanique numérique des fluides.

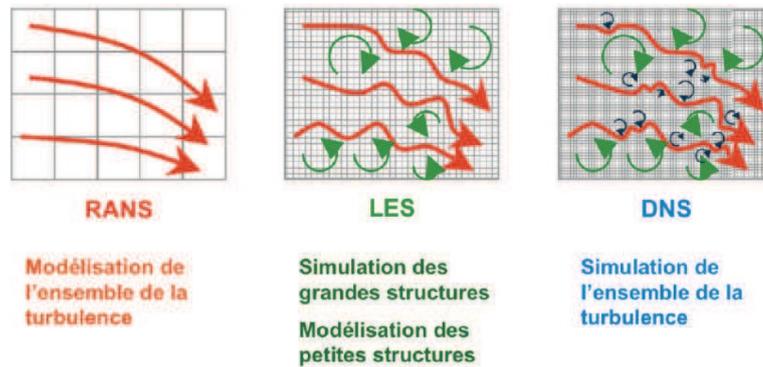


Figure 3-2 : Comparaison entre les principaux modèles de turbulence[47]

Reynolds suggère que les simulations d'équations moyennes de Navier-Stokes ne prennent en compte que la modélisation de quantités physiques telles que la vitesse et la pression tout en favorisant la résolution des échelles de turbulence individuelles. Bien que ces équations comprennent des composants non fermés, il existe une corrélation entre le spectre turbulent et les caractéristiques thermo-chimiques du fluide. Comme les calculs RANS ne tiennent pas compte clairement de toutes les échelles de turbulence, ces facteurs sont responsables de l'influence des plus petites échelles non résolues sur les plus grandes échelles.

Compte tenu de cette contrainte, l'un des principaux défis des simulations RANS est la nécessité de 'fermer' efficacement la dynamique des composants non linéaires de l'interaction entre la turbulence et la chimie [68][69].

En outre, dans le contexte des flammes turbulentes, il convient de noter que la taille des échelles chimiques est souvent inférieure à l'échelle de Kolmogorov. Par conséquent, les interactions entre la chimie et la turbulence ne peuvent pas être résolues directement, ce qui nécessite l'utilisation des modèles numériques tel que LES ou RANS.

Cependant, l'utilisation de la simulation numérique directe (DNS) dans l'étude des écoulements turbulents réactifs présente un grand potentiel pour améliorer la compréhension de la physique sous-jacente de ces écoulements [50][55][56]. En outre, le coût élevé qui y est associé nécessite une évaluation et une optimisation approfondies de tous les composants des outils DNS afin de minimiser les dépenses de calcul[49][57]. L'utilisation d'une cinétique chimique complète pour l'analyse pratique des carburants dans des écoulements tridimensionnels avec des nombres de Reynolds élevés est actuellement un défi pour les simulations numériques directes (DNS) [57][58].

Dans son ouvrage ‘*Turbulent flow*’[39], Pope propose cinq critères différents pour déterminer les modèles de turbulence appropriés :

- i/ Niveau de description
- ii/ L'exhaustivité
- iii/ Le coût et la facilité d'utilisation,
- iv/ champ d'application
- v/ La précision

Il est évident que le DNS représente le cas extrême où une grande précision et une large applicabilité peuvent être atteintes. Quoiqu'il en soit, la description limitée fournie par les fermetures à flux moyen est également adéquate dans de nombreuses applications. Un modèle peut être défini comme complet si les équations qui le composent sont exemptes de spécifications dépendant du débit. Le coût et la facilité d'utilisation représentent la principale raison pour laquelle les méthodes qui offrent un niveau élevé de description de la turbulence ne sont pas utilisées habituellement dans les configurations de flammes réelles due au coût de calcul élevé et complexité de la mise en œuvre du modèle DNS.

Dans cette étude, l'effort principal sera concentré sur la fermeture du terme source chimique pour les flammes turbulentes non-prémélangées. De plus, la configuration des flammes utilisées pour valider les nouvelles idées proposées ici n'est pas complexe ; plus précisément, des flammes de jet à haute turbulence seront simulées. Par conséquent, une approche RANS peut être suffisamment appropriée pour mener une étude réussie sur l'interaction turbulence-combustion dont deux modèles de turbulences sont utilisés ; le RNG-k- ϵ pour simuler le système étudié en régime stationnaire et SST-k- ω qui sera utilisé pour l'étude du régime stationnaire et instationnaire, dans lesquels seules les quantités moyennes des flammes peuvent être prédites, mais qui offre de grands avantages en termes de coûts de calcul.

3.6 Le Modèle de turbulence RANS

Les équations de conservation moyennées de Favre (équations (3-15) à (3-19)) sont résolues dans les modèles RANS pour les écoulements réactifs afin de fermer les contraintes de Reynolds ce qui ont été produites par le processus de moyennage.

Il existe deux types fondamentaux de modèles turbulents qui peuvent être dérivés des équations de transport moyennées de Favre.

1/- En utilisant la méthode de Boussinesq (*Annexe 1*), les contraintes de Reynolds inconnues du premier groupe sont reliées au gradient de vitesse moyen [49][50][59]:

$$-\bar{\rho}u_i''u_j'' = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho}k + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (3-27)$$

Où μ_t est la viscosité turbulente (ou viscosité tourbillonnaire).

L'hypothèse de la viscosité turbulente est utilisée pour relier les contraintes de Reynolds aux variables de l'écoulement moyen. Le principal avantage de ces approches est le coût de calcul minimal associé au calcul de la viscosité μ_t .

En revanche, l'hypothèse de Boussinesq présente un défaut dans le sens où elle suppose que μ_t est une quantité scalaire isotrope, ce qui n'est pas strictement vrai selon [25] et [38].

2/- L'autre approche est utilisée pour déterminer les valeurs non fermées dans la deuxième catégorie de modèles RANS. Les équations de transport pour chaque terme du tenseur des contraintes de Reynolds et pour le taux de dissipation sont résolues dans cette situation. Cela signifie que dans les écoulements en 2D, cinq équations de transport supplémentaires doivent être résolues, et dans les écoulements en 3D, sept équations de transport supplémentaires doivent être résolues. Cette méthode est utilisée par les modèles connus sous le nom de 'Reynolds-stress' ou 'second-moment'.

En outre, la viscosité turbulente μ_t reste inconnue pour les modèles basés sur l'hypothèse de Boussinesq. A cet effet, trois approches principales ont été proposées pour résoudre le problème : des expressions algébriques qui ne nécessitent pas d'équation d'équilibre supplémentaire :[25]

1. Le modèle de longueur de mélange de Prandtl ; est un exemple de modèle à équation zéro dans lequel la viscosité turbulente est liée au gradient de vitesse par une simple expression algébrique. Dans cette approche, une longueur de mélange imposée, qui dépend fortement de la géométrie de l'écoulement.
2. Le modèle de Spalart-Allmaras se caractérise par sa formulation relativement simple à une équation. Il implique la résolution d'une équation de transport pour la viscosité cinématique des tourbillons, ce qui évite à définir l'échelle de longueur caractéristique de manière explicite. La conception de ce modèle a été spécialement adaptée aux applications aéronautiques qui comprennent des écoulements près des parois. Les performances de ce modèle sont avérées et très convaincantes, en particulier dans le contexte des couches limites exposées à des gradients de pression défavorables.
3. Les modèles à deux équations consistent à résoudre deux équations de transport distinctes, ce qui permet de déterminer de manière autonome les échelles de vitesse et de longueur des turbulences. Parmi ces modèles de turbulence qui agissent par ce concept, le modèle standard k- ϵ qui occupe une place importante dans la simulation des écoulements turbulentes. Depuis son introduction par Launder et Spalding, ce modèle s'est imposé comme un moyen essentiel pour effectuer des calculs d'écoulements réalistes.

Dans cette étude on se limite que sur les modèles a utilisés dans notre parcours de recherche, mais ça ne nous empêche pas de citer les modèles les plus utilisé dans le domaine de simulation de la combustion tel que le modèle Wilcox (*Standard k - ω*), LES, et le modèle DNS en annexes.

3.6.1 Le modèle Standard k-ε

Le modèle $k - \varepsilon$ est fréquemment utilisé pour le calcul numérique, c'est un modèle à deux équations, même s'il présente des limites pour certains cas due aux limites dans sa capacité à gérer de manière efficace des situations où des variations de pression importantes. Le modèle affiche une précision abordable pour pas mal de cas dont il a utilisé. Dont, il convient aux itérations initiales, aux calculs approximatifs et aux études paramétriques. L'équation (3-28) [46] donne une explication de la viscosité en circulation.

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3-28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + P_k - \bar{\rho}\varepsilon \quad (3-29)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3-30)$$

$$P_k = -\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (3-31)$$

Les variables σ_k , σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$ et $C_{\varepsilon 2}$ représentent des constantes du modèle. Les valeurs typiques de toutes les constantes sont présentées dans la table (3-1). Le terme source P_k est évident dans l'équation (2-73), comme indiqué dans [60] :

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.00	1.30	1.44	1.92

Table 3-1 : Valeurs des constantes ampériques du modèle k-ε proposé par Poinso et al. [60]

3.6.2 Le modèle RNG-k-ε

Le modèle de turbulence RNG-k-ε (Yakhot et Orszag, 1986) déduit le comportement des tourbillons à grande échelle de celui des tourbillons plus petits en utilisant les propriétés de similarité d'échelle inhérentes à la cascade d'énergie (Bradshaw, 1997).

Ce modèle utilise un coefficient modifié dans l'équation du taux de dissipation ce qui permet l'interaction entre la dissipation turbulente et le cisaillement moyen ce qui donne une bonne prédiction pour les écoulements qui présentant une forte courbure de la ligne de courant comme, les écoulements au-dessus d'une marche orientée vers l'arrière (Yakhot et al, 1992) et les écoulements dans un conduit d'expansion que le modèle de turbulence k-ε standard [61].

Cependant, ses performances se dégradent lorsqu'il s'agit de prédire des écoulements dans une conduite de contraction (Hanjalic, 2004).

Dans le modèle RNG [61][62], l'équation k reste la même, mais l'équation ε est modifiée par l'introduction d'un terme supplémentaire, ce qui rend l'équation de ε comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 3} \bar{\rho} \varepsilon \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (3-32)$$

D'après [61], le terme $C_{\varepsilon 3} \bar{\rho} \varepsilon \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i}$ a été ajouté par Han et Reitz [62] pour prendre en compte

les effets de la compressibilité. Le coefficient $C_{\varepsilon 3}$ est donné par l'équation suivante [62] :

$$C_{\varepsilon 3} = \frac{-1 + 2C_{\varepsilon 1} - 3m(n-1) + (-1)^\delta \sqrt{6} C_\mu C_\eta \eta}{3} \quad (3-33)$$

$$C_\eta \eta = \frac{1}{\beta \eta_0} \quad (3-34)$$

Avec ;

$$\begin{cases} \beta = 0.012 \\ \eta_0 = 4.38 \end{cases}$$

Ainsi, l'équation *RNG k - ε* est fermée avec $C_{\varepsilon 3}$, calculée par l'équation (3-33).

Le tableau suivant illustre les constantes empiriques du modèle.

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$
0.0845	1.39	1.39	1.44	1.92	-0.9 ($\Delta U > 0$) 1.726 ($\Delta U < 0$)

Table 3-2 : Valeurs des constantes empiriques du modèle *RNG-k-ε*. [62]

Cependant, la version classique de ce modèle comporte un désavantage majeur à proximité des parois. On peut expliquer la prédiction inexacte de cette zone par la présence de faibles niveaux de turbulence.

3.6.3 Le modèle SST-k-ω

Le modèle *SST k - ω* est développé par Menter (1991) [63] dont, il a proposé un modèle bicouches qui intègre des éléments du modèle *k - ω* de Wilcox [64] et du modèle *k - ε*. Cette formulation hybride vise à tirer les points forts de chaque modèle, comme : la robustesse et la précision du modèle *k - ω* à proximité des parois et l'indépendance du modèle *k - ε* loin de la paroi et aux conditions extérieures. Dont, Menter a d'abord introduit le modèle ω-k BSL (BaSeLine) [63], qui a ensuite été suivi par le modèle ω-k SST (*Shear Stress Transport*) [65].

L'équation pour le *k* est la même que dans le modèle *k - ε* mais elle peut s'écrire sous la forme suivante,

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = \tilde{P}_k - \beta^* \bar{\rho} k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3-35)$$

L'équation ω s'écrit comme suit :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\omega)}{\partial x_j} = \alpha \frac{\omega}{k} P_k - \beta \bar{\rho}\omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \sigma_\omega \frac{\mu_t}{\rho} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{(1-F_1)}{\omega} \bar{\rho} \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_i} \quad (3-36)$$

Avec ;

$$\begin{cases} P_k = \tau_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \\ \tau_{ij} = \bar{\rho} \nu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \bar{k} \delta_{ij} \\ \mu_t = \frac{\bar{\rho} k}{\omega} \end{cases} \quad (3-37)$$

P_k dans l'équation (3-37) représente le terme de production de l'énergie cinétique turbulente et τ_{ij} est le tenseur des contraintes de Reynolds.

Bien que, les coefficients du modèle sont définis comme suit :

$$\begin{cases} \alpha = \alpha_1 F_1 + \alpha_2 (1 - F_1) \\ \beta = \beta_1 F_1 + \beta_2 (1 - F_1) \\ \sigma_k = \sigma_{k1} F_1 + \sigma_{k2} (1 - F_1) \\ \sigma_\omega = \sigma_{\omega 1} F_1 + \sigma_{\omega 2} (1 - F_1) \end{cases}$$

F_1 : c'est un facteur qui réagit comme suit :

- *Près de la paroi* : plus qu'on est près ($y \approx 0$) de la paroi plus que le facteur F_1 soit plus proche de 1. Cela active le modèle k- ω , qui sert à capturer les phénomènes près des parois.
- *Loin de la paroi* : F_1 tend vers 0 pour $y > 0$, c'est le modèle k- ϵ qui intervient pour calculer les paramètres de la turbulence.

Les constantes du modèle SST-k- ω sont illustrées dans le tableau suivant :

C _{indice}	α	β	σ_k	σ_ω	β^*
1	5/9	0.075	0.85	0.5	0.085
2	0.44	0.0828	1	0.856	

Table 3-3 : Valeurs des constantes ampériques du modèle SST-k- ω

Avec ;

$$\left\{ \begin{array}{l} F_1 = \tanh(\arg^4) \\ \arg = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{k}}{0.09 \cdot \omega \cdot y}, \frac{500\nu}{y^2 \omega} \right); \frac{4\rho\sigma_{\omega 2}k}{C_{k\omega}y^2} \right] \\ C_{k\omega} = \max \left(2\rho\sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_i} \frac{\partial \omega}{\partial x_j}; 10^{-20} \right) \end{array} \right. \quad (3-38)$$

y est la distance de la paroi.

3.7 Modélisation de la combustion non-prémélangée

Au cours des dernières années, divers modèles ont été développés pour simuler la combustion turbulente non-prémélangée.

Comme mentionné dans la littérature, certains modèles supposent que les réactions chimiques sont infiniment rapides, tandis que d'autres, plus avancés, supposent que ces réactions ont une vitesse finie. Dans cette dernière catégorie, les approches les plus courantes sont le modèle de la fonction de densité de probabilité (PDF) [25], le modèle de flammelette [66] et les fermetures de moment conditionnel (CMC) [55]. Le modèle PDF peut être appliqué à la combustion prémélangée comme à la combustion non-prémélangée, car il est moins spécifique dans le choix du modèle de mélange turbulent. Le modèle CMC est étroitement lié au modèle de flammelette et partage ses propriétés en ce qui concerne le mélange. Dans ce contexte, on se limite à la présentation qu'à le concept du modèle de la fonction de densité de probabilité présumé[67][68].

3.7.1 Présentation de la technique PDF

La technique de résolution des problèmes des écoulements à l'aide de la technique de fonction de densité de probabilité est établie en 1969 par Lundgren [69] et S. B. Pope[70] qui ont étudié la jointe (PDF) de la vitesse.

L'équation ci-dessus présente une représentation de forme fermée du flux convectif. Dans le contexte des fermetures pour un écoulement moyen, il est nécessaire d'avoir un modèle qui tienne compte des contraintes de Reynolds, qui sont responsables du transfert de quantité de mouvement [25].

Cependant, il n'est pas nécessaire de décrire ces processus dans l'équation de la fonction de densité de probabilité de la vitesse, ce qui permet d'éviter l'hypothèse de diffusion du gradient. Lundgren a introduit des modèles de relaxation simplifiés pour représenter les variables inconnues et a réussi à dériver des solutions analytiques pour le problème de la fonction de densité de probabilité (PDF) dans le contexte de la dynamique des fluides simple [70].

3.7.1.1 Définition de la PDF

Soit ϕ la valeur d'une variable de composition (la fraction massique d'oxygène, par exemple) qui s'agit d'un point dans un écoulement réactif défini par la coordonnée spatiale x_0 au temps t_0 . Pour faciliter l'analyse, on suppose cet écoulement peut être réalisé autant de fois (événement) et que le temps t est mesuré à partir du début de l'écoulement. Ainsi, à partir de chaque événement, nous obtenons une valeur de ϕ ; étant donné que l'écoulement est turbulent, et toutes les valeurs enregistrées de ϕ sont différentes. Ou encore ; Il n'est pas possible de prédéterminer la valeur de ϕ qui sera obtenue lors d'un événement donné. En d'autres termes, ϕ est une variable aléatoire. Cependant, il est possible d'attribuer une fonction PDF qui permet de donner les probabilités d'avoir une valeur de ϕ dans un intervalle donné [70].

3.7.1.2 Propriétés de la PDF

Soit $f(x)$ la fonction de densité de probabilité pour la variable aléatoire continue x . Voici quelques propriétés de la fonction de densité de probabilité [71][72]:

- La fonction de densité de probabilité est toujours positive pour toutes les valeurs de x soit :

$$f(x) \geq 0, \quad \forall x \in R \quad (3-39)$$

- L'aire totale sous la courbe de densité de probabilité est égale à 1 :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx = 1 \quad (3-40)$$

- La fonction de densité de probabilité d'une variable aléatoire continue sur une seule valeur est nulle ce qui est interprété par :

$$P(x = a) = \int_a^a f(x)dx = 0 \quad (3-41)$$

L'avantage de cette technique c'est qu'on peut introduire d'autres variable dans cette fonction.

Il convient de mentionner que Klimenko et Bilger [73] ont recommandé d'utiliser des fermetures pour les équations moyennées, ce qui semble bien adapté aux flammes non-prémélangées puisque la réaction chimique se produit préférentiellement autour des conditions stœchiométriques. Deux types de modèles de de la PDF sont proposées :

a/ Approche de la PDF présumée.

b/ Approche de la PDF transporté.

3.7.1.3 Concept de la PDF présumée :

Cette méthode suppose une forme spécifique pour la fonction de densité de probabilité (PDF) au départ. Cette forme dépend des moments du premier ordre (valeurs moyennes) de la variable fraction de mélange Z (dénotée par Z et ses cas particuliers Z''^2). La PDF est ensuite calculée en chaque point sur la base de ces moments [74][75], dont les valeurs sont déterminées par des équations expliquées ci-après.

3.7.2 Fraction de mélange moyenne et sa variance

Dans les écoulements turbulents, la valeur moyenne de la fraction de mélange (désignée par Z) indique dans quelle mesure le carburant et l'air sont mélangés localement. En outre, la qualité du mélange des réactifs se reflète également dans la variance Z''^2 . Cette dernière nous indique à quel point les valeurs de la fraction de mélange s'écartent de la moyenne. En analysant à la fois la moyenne Z et la variance de la fraction de mélange. La description du mélange dans l'écoulement turbulent est alors obtenue par les équations suivantes [59]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Z) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_i} - \bar{\rho} u_i'' Z''} \right) \quad (3-42)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Z''^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i Z''^2) &= \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i'' Z''^2})}_{\text{transport turbulent}} \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Z''^2}{\partial x_i}} \right)}_{\text{Diffusion moléculaire}} + \underbrace{2Z'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_i}} \right)}_{\text{Production}} - \underbrace{2 \overline{\rho u_i'' Z''} \frac{\partial Z}{\partial x_i}}_{\text{Production}} - \underbrace{2 \overline{\rho D \frac{\partial Z''}{\partial x_i} \frac{\partial Z''}{\partial x_i}}}_{\text{Dissipation}} \end{aligned} \quad (3-43)$$

On pose :

$$\bar{\rho} \tilde{\chi} = 2 \overline{\rho D \left(\frac{\partial Z''}{\partial x_i} \right)^2} \quad (3-44)$$

C'est le taux de dissipation scalaire des fluctuations du champ de la fraction du mélange Z

Pour le cas où le gradient de Z est nul (cas des flammes homogènes), l'équation (3-43) se réduit à :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Z''^2) = -2 \overline{\rho D \frac{\partial Z''}{\partial x_i} \frac{\partial Z''}{\partial x_i}} = -\bar{\rho} \tilde{\chi}_p \quad (3-45)$$

$\tilde{\chi}_p$; c'est le taux de dissipation scalaire. Cette quantité est très importante dans l'étude des flammes non-prémélangées parce que c'est le critère utilisé pour évaluer les effets de non équilibre de la chimie qui sont causés par la turbulence.

Pour les grands nombres de Reynolds les termes de diffusion moléculaire sont devenus négligeables devant ceux du transport turbulent, alors les équations fermées de Z et Z''^2 prennent la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Z) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \quad (3-46)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} Z''^2) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i Z''^2) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_{t1} \frac{\partial Z''^2}{\partial x_i} \right) + \bar{\rho} D_{t2} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \frac{\partial Z''^2}{\partial x_i} - c \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} Z''^2 \quad (3-47)$$

Les équations (3-44) et (3-45) sont utilisées pour présumer la PDF de Z et P(Z) en utilisant la fonction bêta (β function ou integral d'Euler du premier type). Les équations (4-48) et (4-49) ci-après nous ont permet de calculer les grandeurs moyennes dans chaque point de l'écoulement :

$$Y_k = \int_0^1 Y_k(Z)P(Z)dZ \quad (3-48)$$

$$T = \int_0^1 T(Z)P(Z)dZ \quad (3-49)$$

D'après M. ABRAMOWITZ et I.A. STEGUN[76]. Il est possible d'écrire P(Z) en fonction de la fonction bêta $B(\alpha, \beta)$ dont, P(Z) est donnée par la formule suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} P(Z) = \frac{Z^{\alpha-1}(1-Z)^{\beta-1}}{B(\alpha, \beta)} \\ B(\alpha, \beta) = \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha + \beta)} \\ \alpha, \beta > 0 \end{array} \right. \quad (3-50)$$

Avec Γ ; c'est la fonction gamma définie par le mathématicien suisse Leonhard Euler en 18^e siècle, c'est une extension de la fonction factorielle aux nombres réels[77]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Gamma s = \Gamma(s) = \int_0^{+\infty} e^{-x} x^{s-1} dx \\ s \geq 0 \end{array} \right. \quad (3-51)$$

On signale que la fonction gamma peut être représentée par d'autres formes mais la forme (3-49) est la plus rependue.

Les coefficients α, β de l'équation (3-48) sont calculés par les relations suivantes

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha = \gamma Z \\ \beta = \gamma(1-Z) \\ \gamma = \frac{Z(1-Z)}{Z^2} - 1 \end{array} \right. \quad (3-52)$$

La figure (3-3) illustre le comportement de la fonction bêta pour diverses combinaisons de paramètres (Z et γ). Il est intéressant de noter que la fonction converge vers une distribution de Gauss lorsque Z^2 devient très petit (grand γ). Cependant, des limitations existent ; Pour $\alpha < 1$, une singularité apparaît à $Z = 0$, et pour $\beta < 1$, une singularité apparaît à $Z = 1$. Bien que la fonction bêta offre une bonne flexibilité, elle ne peut pas capturer les distributions avec des singularités à la fois à $Z = 0$ et $Z = 1$, ainsi que ses pics se trouvent entre $0 < Z < 1$ [78].

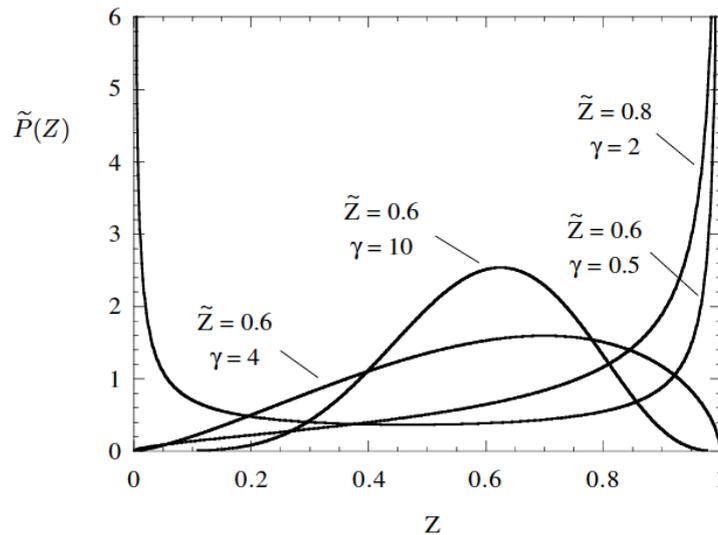


Figure 3-3 : Forme PDF de la Fonction bêta pour Z et γ [78]

Il convient de mentionner que Klimenko et Bilger [73] ont recommandé d'utiliser des fermetures pour ces moyennes, ce qui semble bien adapté aux flammes non-prémélangées puisque la réaction chimique se produit préférentiellement autour des conditions stœchiométriques. Deux types de modèles de de la PDF sont proposées :

- a/ Approche de la PDF présumée.
- b/ Approche de la PDF transporté.

3.8 Modélisation du rayonnement et le modèle P-1

Le terme 'source de chaleur' est exprimé comme suit lorsque le transfert radiatif est important pour la physique des flux réactifs :

$$S = \dot{\omega}_T + \dot{Q}_r \quad (3-53)$$

Ainsi, pour les processus chimiques $\dot{\omega}_T$ est le terme de la source de chaleur et \dot{Q}_r est la perte de chaleur par rayonnement.

En outre, Il a été démontré que le rayonnement était le mécanisme de transfert de chaleur dominant, en particulier entre le mélange réactif et les parois. De plus, le transfert de chaleur vers les parois n'a pas été pris en compte. Cela permet d'adapter un modèle simplifié pour traiter le rayonnement. Ici, le modèle P-1 a été considéré pour calculer la perte de chaleur par rayonnement.

Le modèle de rayonnement P-1 est le cas le plus simple d'un modèle plus général P-N développé par Cheng.[79] Ce modèle est fondé sur l'expansion de l'intensité du rayonnement I en une série orthogonale d'harmoniques sphériques. dont seulement quatre termes de la série sont utilisés, le flux de chaleur radiatif écrit: [80]

$$\bar{\dot{Q}}_r = \Gamma \nabla G \quad (3-54)$$

Où le paramètre Γ est donné par :

$$\Gamma = \frac{1}{(3(a + \sigma_s) - C\sigma_s)} \quad (3-55)$$

Avec a le coefficient d'absorption, σ_s le coefficient de diffusion et C le coefficient linéaire-anisotrope de la fonction de phase.

En défini, G comme le rayonnement incident donné par l'équation de transport suivante :

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - a \cdot G + a \cdot n^2 \cdot \sigma \cdot T^4 = 0 \quad (3-56)$$

Ici, n est l'indice de réfraction du milieu et σ est la constante de Stefan-Boltzmann.

3.9 Conclusion

Dans cette thèse on a largement utilisé les simulations en utilisant les modèles de turbulence (RANS) pour analyser le comportement d'une flamme de diffusion d'hydrogène. La recherche a soigneusement sélectionné et mis en œuvre deux modèles de turbulence, à savoir les modèles RNG-k- ϵ et SST-k- ω , tout en veillant à ce que les paramètres de simulation en régime permanent soient maintenus. En outre, la portée de l'analyse a été élargie pour englober les simulations en régime instationnaire, ce qui permet une compréhension plus complète de la dynamique de la flamme. Notamment, l'application d'une technique de fonction de densité de probabilité (PDF) pour représenter la chimie de l'écoulement réactif a souligné l'importance de donner la priorité à l'utilisation de modèles de turbulence plus simples dans l'analyse de divers paramètres de flamme.

Chapitre 4: Modélisation numérique

4.1 Introduction

Depuis les années 1960, la dynamique des fluides numérique (CFD) a transformé l'industrie aérospatiale en permettant aux ingénieurs de simuler et d'analyser l'écoulement des fluides dans les avions et les moteurs à réaction au cours des processus de conception et de fabrication. Avec les progrès de la puissance de calcul et des capacités logicielles, les techniques de CFD ont également été largement adoptées dans d'autres secteurs, notamment la conception de moteurs à combustion interne, de turbines à gaz et de fours. En utilisant les simulations CFD, les ingénieurs sont en mesure d'optimiser la conception et les performances de ces systèmes complexes, tout en minimisant le coût et le temps nécessaires aux essais physiques et à la validation.

La dynamique des fluides numérique (CFD) est un outil puissant largement utilisé par les constructeurs automobiles pour évaluer les forces de traînée et les flux d'air dans diverses circonstances. Dans l'industrie automobile, les modèles CFD sont utilisés pour simuler l'écoulement de l'air à l'intérieur et autour de la carrosserie, du moteur et du système d'échappement d'une voiture. En analysant ces simulations, les constructeurs peuvent optimiser la conception de leurs véhicules afin de réduire la traînée, d'améliorer le rendement énergétique et les performances globales. Bien que dans les processus industriels. Les simulations CFD sont utilisées pour modéliser l'écoulement des fluides dans un large éventail d'applications, de l'aérospatiale à l'électronique grand public. En analysant ces simulations, les ingénieurs peuvent mieux comprendre le comportement des fluides et optimiser leurs conceptions afin d'améliorer les performances, de réduire les coûts et de renforcer la sécurité.

Dans ce chapitre, nous donnons un aperçu complet des arguments présentés dans cette thèse. Nous commençons par présenter la dynamique des fluides numérique (CFD) et son rôle essentiel en tant qu'outil de conception dans diverses applications. Nous nous penchons ensuite sur la méthode des volumes finis (MVF), en discutant de ses contributions significatives à l'avancement de la CFD. Enfin, nous concluons en formulant des recommandations pour les recherches futures dans ce domaine.

4.2 Aperçu sur la mécanique des fluides numérique (CFD)

La dynamique des fluides numérique (CFD) est une méthode utilisée pour prédire et analyser les comportements d'écoulement des fluides en utilisant des techniques numériques pour résoudre les équations d'écoulement des fluides. Ces équations sont basées sur les principes de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, ainsi que sur le transfert de masse. En transformant les équations aux dérivées partielles en équations algébriques par des méthodes numériques, les simulations CFD peuvent être réalisées par résolutions successives à l'aide de programmes informatiques spécialisés. Cela permet une

analyse détaillée et une compréhension des schémas d'écoulement des fluides et de leur comportement dans différents cas de figure. [74][65].

En outre, La CFD est utilisée dans les processus de conception actuels pour améliorer l'efficacité des produits sans avoir recours à des essais physiques coûteux. Dont, au cours de la dernière décennie, les outils et les méthodes ont été constamment améliorés afin d'augmenter la productivité et de réduire les délais de réalisation. La dernière révolution est venue de l'accélération par le GPU des solveurs CFD, qui a permis de multiplier la vitesse de calcul par dix. Malgré ces améliorations en performances des solveurs, l'un des plus grands défis auxquels les ingénieurs sont confrontés dans leur travail quotidien demeure jusqu'à 80% du temps d'ingénierie est toujours consacré au prétraitement de la géométrie et au maillage [74]. En plus, la CFD présente plusieurs avantages par rapport aux approches expérimentales, il s'agit de :

Les avantages de l'utilisation des technologies avancées tels que les CFD dans l'analyse et la conception des systèmes sont les suivants [81]:

1. Réduction du temps et du coût des nouvelles conceptions grâce à la simulation et à l'essai des systèmes avant leur construction.
2. Possibilité d'examiner des systèmes complexes et dangereux qui sont difficiles à tester par les méthodes expérimentales traditionnelles.
3. Analyse des systèmes dans des environnements risqués, ce qui permet d'optimiser les performances, de réduire les émissions et d'améliorer la sécurité.

Il est important de noter que les codes CFD sont construits autour d'algorithmes numériques capables de résoudre les problèmes de dynamique des fluides. En général, ces codes se composent de trois parties essentielles : un préprocesseur, un solveur et un postprocesseur.

Pour rendre leur puissance de résolution plus accessible, les codes (CFD) sont composés de trois éléments clés qui travaillent ensemble pour simuler le comportement de l'écoulement des fluides : le pré-processeur, le solveur et le post-processeur. Le pré-processeur est chargé de définir la géométrie, de créer le maillage et de spécifier les conditions initiales et limites. Le solveur est le cœur du code CFD, qui résout les équations gouvernantes à l'aide de méthodes numériques pour calculer le champ d'écoulement des fluides. Le post-processeur contient une série d'outils et de fonctionnalités qui permettent aux utilisateurs d'analyser et d'interpréter les résultats de la simulation, tels que des outils de visualisation, des outils de traitement et d'analyse des données et des outils d'analyse statistique. En utilisant ces trois éléments, les codes CFD peuvent prédire les phénomènes d'écoulement des fluides et fournir des informations sur des problèmes complexes de dynamique des fluides.

4.3 Discrétisation des équations de Navier-Stokes

Dans cette section, nous étudierons le processus de résolution du système d'équations abordé au chapitre 2.

La présentation de la méthode des volumes finis est divisée en plusieurs phases. Dans un premier temps, nous montrerons comment exprimer une équation de transport générale à l'aide de la méthode des volumes finis. Cette technique est essentielle pour comprendre la solution numérique des équations de Navier-Stokes, en mettant l'accent sur son intégration dans la

méthodologie de résolution. Pour toutes les techniques de discrétisation, les critères suivants peuvent être utilisés pour évaluer ces équations. Pour tous les méthodes de discrétisation de telle équations peuvent être évaluées en fonction des critères suivantes [82][83] :

a- Loi de conservation[84] :

Lorsqu'il s'agit de simulations numériques impliquant le transport d'une propriété telle que la masse, l'énergie ou la quantité de mouvement, il est essentiel de s'assurer que la propriété est préservée dans l'ensemble du domaine de calcul. Cela signifie que la quantité de propriété sortante d'une cellule par une face doit être égale à la quantité de propriété entrante dans la cellule voisine par la même face afin de maintenir l'équilibre. Ce principe, connu sous le nom de conservation. C'est un concept fondamental dans de nombreux domaines de l'ingénierie et de la physique.

b- La précision [59][85]:

La précision quantifie l'exactitude des mesures ou des calculs effectués. Identifier directement la solution la plus précise peut s'avérer complexe. Dans ce contexte, l'analyse de l'erreur de calcul devient un outil nécessaire pour évaluer la qualité des résultats. Bien que, elle permet d'estimer la vitesse de convergence de l'erreur, c'est-à-dire la rapidité avec laquelle l'erreur diminue en fonction du raffinement du maillage.

c- La convergence [86]:

Cette expression particulière a de multiples applications. En général, le processus de convergence est prouvé lorsqu'une solution est obtenue. Cependant, elle peut également indiquer qu'une solution reste stable dans le temps ou avec un raffinement croissant du maillage. Lorsqu'il s'agit de méthodes itératives, nous utilisons cette expression pour décrire l'écart entre les itérations successives, également connu sous le nom de résidu, qui est limité à un seuil spécifique pour que la solution du système atteigne la convergence.

d- La cohérence [50]:

Une méthode numérique est dite cohérente si les solutions approximatives calculées convergent vers la solution exacte lorsque la taille de la grille de calcul et le pas de temps sont réduits à zéro. En d'autres termes, une méthode cohérente garantit que l'erreur entre les solutions approximatives et exactes diminue à mesure que la résolution de la simulation augmente. Cette propriété est cruciale pour garantir la précision et la fiabilité des modèles de calcul dans divers domaines de l'ingénierie, de la physique et des mathématiques appliquées.

e- La stabilité [87]:

Lorsqu'il s'agit de problèmes qui se produisent sur une courte période, tels que les problèmes transitoires, la stabilité d'une méthode est déterminante. Une méthode stable garantit que les erreurs n'augmentent pas de manière incontrôlée au fur et à mesure que le temps passe. En outre, la stabilité peut également se référer à la façon dont une méthode de solution itérative réagit aux erreurs ou à la façon dont les modifications des conditions initiales ou limites affectent la précision de la solution. Par conséquent, la stabilité est une exigence fondamentale pour toute méthode visant à produire des résultats fiables et précis.

4.4 Méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis (MVF) est une technique numérique qui transforme les équations aux dérivées partielles représentant des lois de conservation sur des volumes différentiels en équations algébriques discrètes sur des volumes finis [88]. Comme pour la méthode des différences finies ou des éléments finis, la première étape du processus de résolution consiste à discrétiser le domaine géométrique ; dans la méthode des volumes finis, les équations différentielles partielles sont ensuite discrétisées en les transformant en équations algébriques qui seront intégrées dans chaque élément ou volume de contrôle. Le système d'équations algébriques est ensuite résolu pour calculer les valeurs de la variable dépendante pour chacun des éléments [65] [88].

La méthode des volumes finis (MVF) est une méthode numérique très réputée, largement utilisée pour résoudre les équations aux dérivées partielles. Il s'agit d'un outil fondamental dans le domaine de la recherche en dynamique des fluides. Les avantages de cette méthode par rapport à la méthode des différences finies sont les suivants :

1. La discrétion spatiale, qui fait référence à la manière dont un modèle mathématique est discrétisé en un maillage d'éléments plus petits, peut être ajustée pour s'adapter à des frontières de forme irrégulière et affinée dans des zones spécifiques pour atteindre une plus grande précision. Cela permet une modélisation plus précise des systèmes complexes.
2. Les expressions intégrales, qui sont des représentations mathématiques de phénomènes physiques dérivés de lois fondamentales, sont fréquemment utilisées pour décrire des équations dans les domaines scientifiques. Ces expressions peuvent donner un aperçu de la physique sous-jacente d'un système et aider à développer des modèles plus précis.
3. La méthode des volumes finis est une technique numérique de résolution des équations différentielles. Contrairement à d'autres méthodes, elle ne nécessite pas que les variables soient dépendantes ou différentiables. Elle est donc bien adaptée à la résolution d'un large éventail de problèmes, y compris ceux qui présentent des maillages non uniformes ou des géométries complexes.

4.4.1 Forme intégrale de la méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis (MVF) est applicable dans les domaines unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) ou tridimensionnels (3D). Cependant, une approche 2D englobe efficacement ses composants fondamentaux et peut être facilement étendue à des dimensions supérieures ainsi qu'à des systèmes d'équations. Par conséquent, nous allons construire la formulation de la méthode des volumes finis (MVF) en considérant une seule équation aux dérivées partielles (EDP) bidimensionnelle simple. Cette EDP sera interprétée comme représentant du mouvement d'un fluide (liquide ou gaz) soluble dans un écoulement uniforme. Qui, on le présente par l'équation de forme différentielle 2D suivante :

$$\frac{\partial U}{\partial t} + v_x \frac{\partial U}{\partial x} + v_y \frac{\partial U}{\partial y} = 0 \quad (4-1)$$

Les variables indépendantes sont t (temps, [s]) et x, y (espace, [m]).

La variable dépendante est $U(t, x, y)$ et v_x et v_y sont des vitesses d'écoulement constantes [m/s] dans les directions x et y respectivement.

Dont les conditions initiales sont les suivantes :

$$U(t=0, x, y) = f(x, y) \quad (4-2)$$

Il est facile de montrer que la solution exacte de (4-1) est :

$$U(t, x, y) = f(x_0 + v_x t, y_0 + v_y t) \quad (4-3)$$

Le traitement suivant la méthode des volumes finis (FVM) exige que (4-1) soit écrit sous une forme spéciale que nous appellerons forme de volume fini. Soit,

$$\begin{cases} \vec{H} = U \cdot \vec{v} \\ \vec{v} = v_x \vec{i} + v_y \vec{j} \end{cases} \quad (4-4)$$

Avec \vec{v} : est la vitesse d'écoulement, \vec{i} et \vec{j} sont les vecteurs unitaires pour un repère cartésien.

On signale que l'unité des composantes de \vec{H} est (kg/s)/m. $\vec{H} = \vec{H}(U)$ est appelé densité de flux et est un champ vectoriel. Les composantes de \vec{H} mesurent le taux de flux de masse à travers une ligne de longueur unitaire.

Ecrivant l'équation (4-1) selon la forme MVF déjà adopter en (2-4) :

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \vec{H} = 0 \\ \nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} \end{cases} \quad (4-5)$$

Dans le calcul vectoriel, la quantité scalaire, $\nabla \vec{H}$, est souvent écrite $div(\vec{H})$ et représente la divergence du champ de vecteurs \vec{H} .

L'intégration de (4-5) sur une région arbitraire (simplement connectée) R dans le plan (xy) donne :

$$\iint_R \left(\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \vec{H} \right) dR = \iint_R \frac{\partial U}{\partial t} dR + \iint_R \nabla \vec{H} dR = 0 \quad (4-6)$$

En utilisant une forme du théorème de Green, le deuxième intégral dans (4-6) peut être remplacé par un intégral selon un contour autour de périmètre S qui entoure la région R :

$$\iint_R \frac{\partial U}{\partial t} dR + \oint_S \vec{H} \cdot \vec{n} ds = 0 \quad (4-7)$$

Où \vec{n} est le vecteur normal unitaire à S pointant vers l'extérieur en tout point de R. En définissant \bar{U} comme la valeur moyenne de U sur R, alors, réécrivant l'équation (4-7) en fonction de \bar{U} :

$$\begin{cases} A \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \oint_S \vec{H} \cdot \vec{n} ds = 0 \\ A = \iint_R dR \end{cases} \quad (4-8)$$

Où A est l'aire de R. Enfin, nous réécrivons (4-8) pour obtenir,

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = \frac{1}{A} \oint_S \vec{H} \cdot \vec{n} ds \quad (4-9)$$

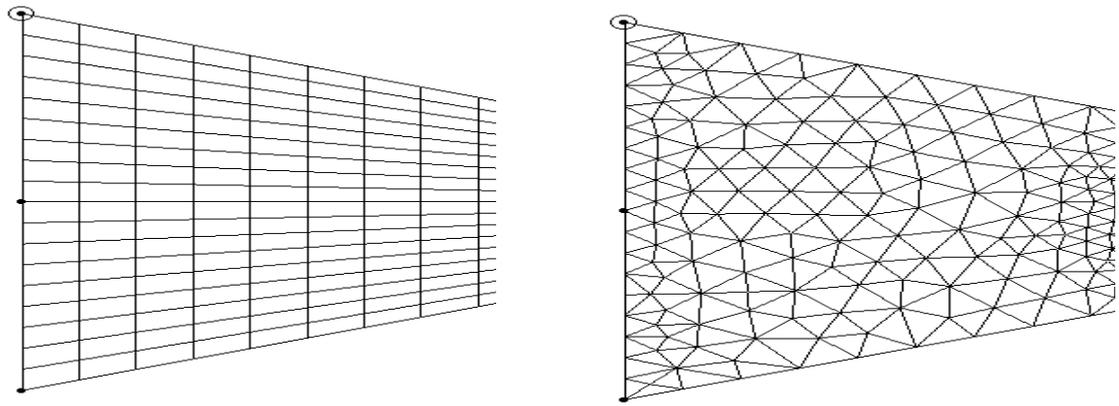
La forme semi-intégrale de (4-1) est l'équation (4-9) qui s'applique à toute région du plan x-y où (4-1) est valide. Dans la méthode des volumes finis, la discrétion spatiale est réalisée en divisant d'abord la région de calcul en un maillage constitué d'un nombre limité de cellules polygonales. On applique l'équation (4-9) à chaque cellule afin de générer un schéma de volumes finis (SVF). Il est possible de choisir les formes des cellules de manière arbitraire afin de s'adapter aux limites de la région de calcul.

4.5 Le maillage

Les maillages à volume fini sont un outil essentiel dans le domaine de la dynamique des fluides. Il existe deux catégories principales de maillages de volumes finis : les maillages structurés et les maillages non structurés. Un maillage structuré est un arrangement de cellules sous forme de grille, où chaque cellule est identifiée par une paire d'indices ordonnés. Ces indices, généralement désignés par i et j, permettent d'identifier facilement les cellules et leurs voisins adjacents. Il est important de noter que les maillages structurés en 2D doivent avoir exactement quatre côtés. L'un des principaux avantages de l'utilisation d'un maillage structuré est la facilité de stockage des données dans des tableaux 2D, ce qui simplifie l'extraction des données. En outre, les maillages structurés permettent d'utiliser des schémas de division dimensionnelle, ce qui peut réduire considérablement le temps de calcul.

En revanche, les maillages non structurés ne suivent pas un modèle de grille régulier et leurs cellules sont identifiées par un seul index. Dans les maillages non structurés en 2D, les cellules triangulaires sont couramment utilisées. L'emplacement des cellules adjacentes n'est pas automatiquement connu dans les maillages non structurés, ce qui se traduit par des structures de données plus complexes nécessitant davantage de stockage de données. Toutefois, pour les géométries complexes, les maillages non structurés sont plus faciles à produire que les maillages structurés.

La figure (4-1) présente une visualisation des maillages de volumes finis. Ces mailles servent à correspondre aux limites du domaine de calcul. Il est à noter que la méthode des volumes finis reste référencée au système de coordonnées cartésiennes. Dans cette méthode, les flux à travers les côtés de la cellule qui sont alignés dans n'importe quelle direction. Cette approche permet une compréhension plus complète du comportement de la dynamique des fluides dans un système donné et peut fournir des informations plus précises sur les processus physiques.



(a) : Maillage structuré

(b) : Maillage non structuré

Figure 4-1 : Modèles de maillage utilisés dans la Méthode des volumes finis

4.6 Discrétisation de l'équation semi-intégrale

Dans la section suivante, nous explorerons une cellule générale qui s'adapte à la fois aux maillages structurés et non structurés. Pour plus de clarté, nous nous concentrerons sur un maillage structuré pour les besoins de notre discussion.

4.6.1 Les mailles

Pour résoudre l'équation (4-9) sur un maillage de calcul, on utilise un schéma de volume fini. Ce schéma décompose l'équation en parties plus petites qui peuvent être résolues indépendamment dans chaque cellule du maillage. Les cellules sont représentées par l'indice k . Soit ;

A_k ; la surface de la cellule k

u_k^n ; est la valeur moyenne (approximative) de U dans la cellule k au niveau du pas du temps n . Dont, elle est située au centre de la cellule.

\vec{s}_k ; est un vecteur normal propre un côté de la cellule k , pointant vers l'extérieur dont sa portée est la longueur du côté considéré.

La figure (4-2) présente des données de cellules pour le pas du temps n pour une cellule générale à volume fini, k , à 4 côtés. La densité de flux moyenne \bar{H} , est indiquée sur une seule face dont le vecteur latéral est noté \vec{s} . Les autres densités de flux moyennes sur les faces de la cellule ne sont pas représentées, bien que les vecteurs latéraux soient indiqués sans être notés.

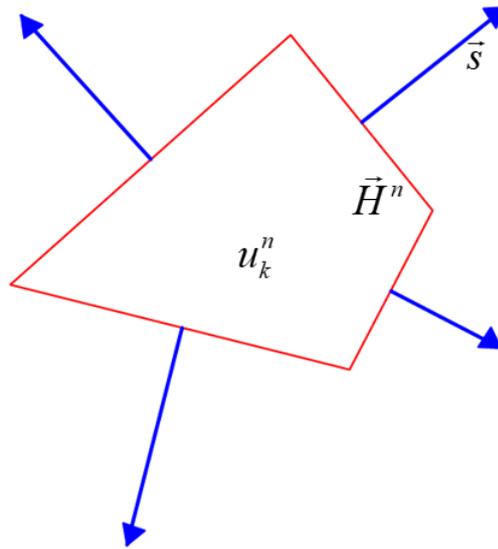


Figure 4-2 : Représentation d'une cellule pou volume fini

4.6.2 Discrétisation

La discrétisation est un processus mathématique qui consiste à convertir des équations différentielles partielles (EDP) en un ensemble discret d'équations algébriques. Ce processus est fondamental en analyse numérique et est utilisé pour obtenir des solutions à des problèmes complexes qui ne peuvent pas être résolus analytiquement. En divisant le problème en parties plus petites et plus faciles à gérer, la discrétisation nous permet de trouver la solution des équations originales à des points spécifiques dans l'espace et le temps. Le processus de discrétisation peut être décomposé en deux étapes : la discrétisation du domaine de solution et la discrétisation de l'équation gouvernante. La première consiste à diviser le domaine de solution en régions plus petites, tandis que la seconde consiste à approximer l'équation différentielle à l'aide d'un ensemble d'équations algébriques discrètes [89].

Lorsque l'on utilise des méthodes numériques pour résoudre des problèmes, il est important de diviser le domaine de la solution en plus petits éléments. C'est ce qu'on appelle la discrétisation, qui consiste à diviser l'espace en un nombre limité de régions, appelées volumes de contrôle ou cellules. Si le problème évolue dans le temps, l'intervalle de temps est également divisé en un nombre limité de pas de temps.

Une fois que nous avons discrétisé le domaine de la solution, nous pouvons alors discrétiser les équations de base. Cela implique de transformer les termes de l'équation en un système d'équations algébriques discrètes qui peuvent être résolues à l'aide de techniques numériques. En combinant la discrétisation du domaine de solution et les équations directrices, nous créons une description numérique du problème qui peut être résolu à l'aide de méthodes numériques [90].

. La deuxième étape de la résolution du problème consiste à intégrer les équations qui décrivent le problème sur tous les volumes de contrôle. Pour que cette étape soit efficace, il est nécessaire de convertir les équations du problème en un système d'équations linéaires. Ce processus nécessite une compréhension approfondie des principes sous-jacents et des hypothèses qui régissent le problème en question. En intégrant soigneusement les équations sur

les volumes de contrôle, il est possible de parvenir à une solution qui reflète fidèlement le comportement du système étudié.

4.6.2.1 Discrétisation spatiale

La partie spatiale de l'équation (4-9) est une intégrale de contour fermé le long du périmètre de la cellule k. Cette intégrale donne le flux total \vec{H} sortant de la cellule k. Par conséquent, le flux total à travers un côté de la cellule k est $\vec{H} \cdot \vec{s}$, où \vec{s} est le vecteur latéral et \vec{H} est la valeur (constante) de la densité de flux sur le côté. \vec{H} dépend de U qui est déterminé au centre de la cellule k dans le temps n par u_k^n . Soit \vec{H}^n le flux (constant) au niveau de temps (ou itération) n sur un côté de la cellule k. Par la suite, on peut approximer l'intégrale de l'équation (4-9) sur la cellule k par ;

$$\int_S \vec{H} \cdot \vec{ds} = \sum_{\text{côtés}} \vec{H}^n \cdot \vec{s} \quad (4-10)$$

Plutôt que d'introduire un système d'indexation compliqué pour les côtés des cellules, on suppose que la somme porte sur chaque côté de la cellule k. La discrétisation spatiale de l'équation (4-1) est donc,

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial t} = -\frac{1}{A_k} \sum_{\text{côtés}} \vec{H}^n \cdot \vec{s} \quad (4-11)$$

4.6.2.2 La discrétisation temporelle

La discrétisation temporelle de (4-11) peut prendre plusieurs formes. Pour une forme plus simple, on utilisera l'approximation de la différence directe du premier ordre pour la dérivation temporelle, de sorte que (4-11) devient,

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = -\frac{1}{A_k} \sum_{\text{côtés}} \vec{H}^n \cdot \vec{s} \quad (4-12)$$

Δt ; est le pas du temps entre l'itération n et n+1.

Par réarrangement de l'équation (4-12), on obtient le schéma de volumes finis (FVS) ;

$$u_k^{n+1} = u_k^n - \frac{\Delta t}{A_k} \sum_{\text{côtés}} \vec{H}^n \cdot \vec{s} \quad (4-13)$$

L'équation (4-13) peut être considérée comme un schéma général de volumes finis (compte tenu de la discrétisation du temps avec un pas fixe).

4.6.3 Schémas de la méthode des volumes finis

La méthode des volumes finis (MVF) appliquée aux EDP s'écrit sous la forme,

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{H} = Q \quad (4-14)$$

$\vec{H} = \vec{H}(U)$; est le vecteur de flux (densité) et Q est un terme source (qui a été zéro dans la section précédente).

Par souci de simplicité, on se concentre sur les EDP 2D. Par application du théorème de Green, l'intégration de (4-14) sur une région R de surface A et de périmètre C donne ;

$$A \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \oint_C \vec{H} \cdot \vec{n} ds = A \bar{Q} \quad (4-15)$$

Où \bar{U} et \bar{Q} dénotent les valeurs moyennes des variables considérées sur R et \vec{n} est le vecteur normal unitaire pointant vers l'extérieur en chaque point de C. En réarrangeant et en supprimant les barres, on obtient ;

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{1}{A} \oint_C \vec{H} \cdot \vec{n} ds + Q \quad (4-16)$$

Dans le domaine de la dynamique des fluides, l'équation (4-16) est évidemment vraie pour tout domaine arbitraire R. dont, la méthode des volumes finis (MVF) sert à discrétiser le domaine R en mettant en œuvre un maillage composé de cellules polygonales. Par la suite, elle approxime l'équation sur chaque cellule du maillage.

La discrétisation de (4-16) sur une cellule k à l'aide d'une différence directe du premier ordre dans le temps donne,

$$\frac{u_k^{n+1} - u_k^n}{\Delta t} = -\frac{1}{A_k} \left(\sum_{\text{côtés}} \vec{H}^n \cdot \vec{s} \right) + q_k^n \quad (4-17)$$

Où ;

- Δt est le pas de temps entre les itérations du temps n et n+1,
- u_k^n et q_k^n sont les valeurs moyennes (approximatives) de U et Q respectivement pour les itérations temporel n situé au centre de la cellule k,
- A. est la surface de la cellule k

En appliquant (4-17) à une maille structurée dont les cellules sont indexées par (i, j) et, pour simplifier, on pose Q = 0, on obtient ;

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{A_{i,j}} \sum_{\text{côtés}} \vec{H}^n \cdot \vec{s} \quad (4-18)$$

En adoptant une convention qui consiste à utiliser 1/2 dans les indices pour dénoter les côtés des cellules dans une maille structurée (voir figure 3-1a), l'équation (4-18) devient ;

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{A_{ij}} \left(\begin{aligned} &\vec{H}_{i+1/2,j}^n \cdot \vec{s}_{i+1/2,j} + \vec{H}_{i,j+1/2}^n \cdot \vec{s}_{i,j+1/2} + \\ &\vec{H}_{i-1/2,j}^n \cdot \vec{s}_{i-1/2,j} + \vec{H}_{i,j-1/2}^n \cdot \vec{s}_{i,j-1/2} \end{aligned} \right) \quad (4-19)$$

Remarques :

- L'équation (4-19) peut être considérée comme un schéma explicite général de la méthode des volumes finis (FVS).
- (4-19) est du premier ordre dans le temps en raison de la discrétisation temporelle utilisée, mais une précision temporelle d'ordre supérieur pourrait être obtenue par une approche en plusieurs étapes.
- Un schéma (FVS) particulier basé sur (4-19) est construit en estimant les flux d'interface (c'est-à-dire les valeurs \vec{H} sur les côtés des cellules).
- Puisque $\vec{H} = \vec{H}(U)$, l'estimation du flux d'interface peut être effectuée par extrapolation pour les valeurs de U au centre de la cellule et aux interfaces ou par extrapolation directe des valeurs \vec{H} du centre de la cellule aux interfaces.

4.6.4 Schéma de MVF sur un maillage cartésien

Avant de mettre en œuvre (4-19) sur un maillage structuré général, il est instructif de l'appliquer au cas particulier d'un maillage cartésien avec des côtés de cellule constants de longueurs Δx et Δy dans les directions x et y respectivement. La figure (4-3) montre les cellules (i, j) et les variables correspondantes [91].

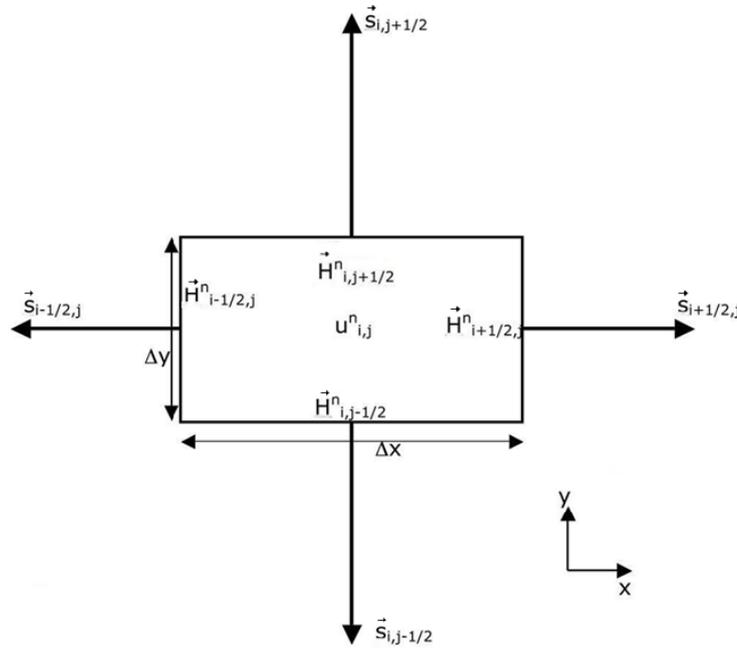


Figure 4-3: Cellule cartésienne (i, j) montrant les vecteurs latéraux et les variables.

Les vecteurs latéraux sont clairement parallèles aux axes x et y , alors qu'on a :

$$\begin{cases} \vec{s}_{i,j-1/2} = 0\vec{i} - \Delta x\vec{j}, \vec{s}_{i+1/2,j} = \Delta y\vec{i} + 0\vec{j} \\ \vec{s}_{i,j+1/2} = 0\vec{i} + \Delta x\vec{j}, \vec{s}_{i-1/2,j} = -\Delta y\vec{i} + 0\vec{j} \\ A_{ij} = \Delta x\Delta y \end{cases} \quad (4-20)$$

Par conséquent, (4-19) devient ;

$$\mathbf{u}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{u}_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{A_{ij}} \left(\begin{array}{l} \vec{H}_{i+1/2,j}^n \cdot (\Delta y \vec{i}) + \vec{H}_{i,j+1/2}^n \cdot (\Delta x \vec{j}) + \\ \vec{H}_{i-1/2,j}^n \cdot (-\Delta y \vec{i}) + \vec{H}_{i,j-1/2}^n \cdot (-\Delta x \vec{j}) \end{array} \right) \quad (4-21)$$

En écrivant \vec{H} en mode vectorielle :

$$\vec{H} = E\vec{i} + P\vec{j} \quad (4-22)$$

Donc, l'équation (4-21) devient :

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y} \left(E_{i+1/2,j}^n \cdot \Delta y \vec{i} + P_{i,j+1/2}^n \cdot \Delta x \vec{j} - E_{i-1/2,j}^n \cdot \Delta y \vec{i} - P_{i,j-1/2}^n \cdot \Delta x \vec{j} \right) \quad (4-23)$$

Et qu'on peut l'écrire sous la forme suivante :

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \Delta t \left(\left[\frac{E_{i+1/2,j}^n - E_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} \right] + \left[\frac{P_{i,j+1/2}^n - P_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \right] \right) \quad (4-24)$$

4.6.5 Schéma de premier ordre en amont

Nous appliquons (4-24) sur un domaine 2D. Dont à poser, $\vec{H} = E\vec{i} + P\vec{j}$ où $E\vec{i} = (v_x U)\vec{i}$ et $P\vec{j} = (v_y U)\vec{j}$, par simplification de (4.24) on aboutit à l'équation suivantes ;

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \Delta t \left(v_x \left[\frac{u_{i+1/2,j}^n - u_{i-1/2,j}^n}{\Delta x} \right] + v_y \left[\frac{u_{i,j+1/2}^n - u_{i,j-1/2}^n}{\Delta y} \right] \right) \quad (4-25)$$

A l'itération temporelle n on connaît $u_{i,j}^n$ qui est au centre la cellule (i, j) mais il reste à déterminer $u_{i+1/2,j}^n$, $u_{i-1/2,j}^n$, $u_{i,j+1/2}^n$, $u_{i,j-1/2}^n$ qui se trouvent sur les quatre interfaces de la cellule (i, j) avec ses quatre cellules voisines. Supposons que les composantes de la vitesse d'écoulement v_x et v_y sont toutes les deux positives. Une procédure d'estimation raisonnable consiste à prendre les valeurs u de l'interface à partir des valeurs connues des centres de cellule voisins en amont (voir figure 4-4). On obtient ainsi ;

$$\begin{cases} u_{i+1/2,j}^n \approx u_{i,j}^n \\ u_{i-1/2,j}^n \approx u_{i-1,j}^n \\ u_{i,j+1/2}^n \approx u_{i,j}^n \\ u_{i,j-1/2}^n \approx u_{i,j-1}^n \end{cases} \quad (4-26)$$

Et l'équation (4.25) devient ;

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \Delta t \left(v_x \left[\frac{u_{i,j}^n - u_{i-1,j}^n}{\Delta x} \right] + v_y \left[\frac{u_{i,j}^n - u_{i,j-1}^n}{\Delta y} \right] \right) \quad (4-27)$$

On note que ;

- L'équation (4-27) a été dérivée sur la base de quantités moyennées sur les cellules et sur le flux aux interfaces des cellules. Il s'agit donc d'un schéma de volumes finis.
- L'estimation des flux d'interface peut être considérée comme une extrapolation des valeurs u du centre de la cellule aux interfaces de la cellule en utilisant les gradients de u . Dans ce cas, on suppose que le gradient de u dans chaque cellule est nul, de sorte qu'il prend la même valeur à l'interface (en aval) qu'au centre de la cellule.
- Cette méthode produit une seule valeur de \vec{H} à une interface.

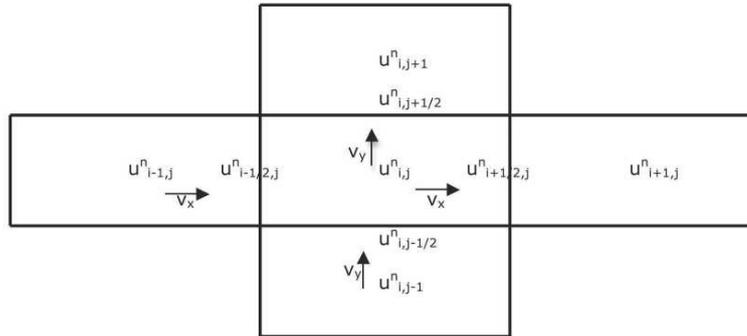


Figure 4-4 : Valeurs d'interface pour un FVS d'advection linéaire 2D Upwind

4.7 Calcul du pas de temps pour un schéma à volumes finis

L'équation (4-19) est le schéma de volumes finis générale sur un maillage structuré qu'on adopte dans ce manuscrite. Bien que le schéma soit explicite, donc nous nous attendons à ce que le pas de temps, Δt , soit limité par des considérations de stabilité. Contrairement à la méthode des différences finies (FDM), la méthode de volumes finis (MVF) ne dispose pas d'une théorie de stabilité facilement accessible, dont, on est obligé à utiliser des approches pour déterminer le pas de temps maximal autorisé. Toute formule que nous construisons doit avoir un sens sur un maillage cartésien.

En admettant que pour le pas de temps Δt est lié à la cellule considérée, alors, il ne devrait pas pouvoir se propager à travers plus d'une cellule. Il est donc raisonnable que Δt dépende directement de la taille de la cellule mais inversement aux composantes de la 'vitesse d'écoulement' \vec{v} , normale aux faces de la cellule.

On considère qu'il y a deux directions d'écoulement, à savoir la direction i et la direction j . La 'longueur' de la cellule (i, j) dans la direction i est approximativement le rapport de sa surface $A_{i,j}$ par la longueur du côté dans la direction j .

En utilisant le côté $(i+1/2, j)$, cette longueur est $\|s_{i+1/2,j}\|$. La composante de la vitesse d'écoulement dans la direction i est $\vec{v} \cdot \vec{n}_{i+1/2,j}$; où $\vec{n}_{i+1/2,j}$ est le vecteur normal unitaire au côté de la cellule $(i+1/2, j)$. Par conséquent, le pas de temps maximum, Δt , dans la direction i est donné par la formule suivante ;

$$\Delta t \leq \frac{A_{i,j} / \|\vec{s}_{i+1/2,j}\|}{|\vec{v} \cdot \vec{n}_{i+1/2,j}|} \quad (4-28)$$

Par définition, $\vec{s}_{i+1/2,j} = \|\vec{s}_{i+1/2,j}\| \cdot \vec{n}_{i+1/2,j}$ qu'on va substituer dans (4-28) pour aboutir à :

$$\Delta t \leq \frac{A_{i,j}}{|\vec{v} \cdot \vec{s}_{i+1/2,j}|} \quad (4-29)$$

De même, le pas de temps maximal Δt , dans la direction j est ;

$$\Delta t \leq \frac{A_{i,j}}{|\vec{v} \cdot \vec{s}_{i,j+1/2}|} \quad (4-30)$$

Par conséquent, une formule pour le pas de temps global, Δt , est la suivante ;

$$\Delta t \leq \min_{i,j} \left\{ \frac{A_{i,j}}{\max \left\{ |\vec{v} \cdot \vec{s}_{i+1/2,j}|, |\vec{v} \cdot \vec{s}_{i,j+1/2}| \right\}} \right\} \quad (4-31)$$

Pour chaque cellule, on estime la longueur des cellules et les composantes de la vitesse d'écoulement dans les directions i et j. Ces directions se réfèrent au maillage et ne doivent pas être confondues avec les directions x et y indiquées par les vecteurs de base cartésiens i et j. En outre, Les valeurs absolues maximales sont utilisées pour déterminer la composante maximale de la vitesse d'écoulement.

Si nous appliquons (4-31) à l'équation d'advection linéaire 1D dans la direction x avec des cellules rectangulaires uniformes. Dont ;

$$A_{i,j} = \Delta x \Delta y, \quad \vec{v} = v_x \vec{i} \quad \text{et} \quad s_{i+1/2,j} = \Delta y \quad \text{Alors (4.34) devient ;}$$

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{|v_x|} \quad (4-32)$$

L'équation (4-32) signifie que l'évènement ne peut pas traverser plus d'une cellule en un seul pas de temps, ce qui est logique et qui est conforme à notre raisonnement initial.

4.8 Schéma de volume fini du premier ordre en amont pour un domaine 2D

En dérivant un FVS pour l'équation d'advection linéaire en 2D. Dans cette équation, $\vec{H} = \vec{v}U$ où $\vec{v} = v_x \vec{i} + v_y \vec{j}$. On estime U aux interfaces des cellules par les valeurs de u au centre des cellules voisines en amont (*the upwind neighbouring cell centre values*). Nous prenons le cas le plus simple où les vitesses d'écoulement sont toujours positives dans les directions i et j, c'est-à-dire ;

$$\begin{cases} \forall i, j \\ \vec{v} \cdot \vec{s}_{i+1,j} \geq 0, \vec{v} \cdot \vec{s}_{i,j+1} \geq 0 \end{cases} \quad (4-33)$$

Les estimations de u aux interfaces sont données par (4-26) et le schéma général FVS (4-19) devient le schéma du premier ordre en amont (*First Ordre Upwind*) qui peut être écrit sous la forme suivante ;

$$u_{i,j}^{n+1} = u_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{A_{i,j}} \left(u_{i,j}^n \vec{v} \cdot \vec{S}_{i+1/2,j} + u_{i,j}^n \vec{v} \cdot \vec{S}_{i,j+1/2} + u_{i-1,j}^n \vec{v} \cdot \vec{S}_{i-1,j} + u_{i,j-1}^n \vec{v} \cdot \vec{S}_{i,j-1} \right) \quad (4-34)$$

Dont, les remarques qui peuvent être tirées de ce schéma sont les suivantes ;

- Le schéma de volume finis (FVS) en amont est dérivé de l'hypothèse (4-34) et peut être facilement adapté au cas général où les composantes de l'écoulement peuvent être dans n'importe quelle direction.
- Le schéma en amont peut être considéré comme une extrapolation de u des centres des cellules et leurs interfaces dans la direction de l'écoulement, sur la base d'un gradient nul de u dans chaque cellule, ce qui donne un schéma spatial de premier ordre. Une plus grande précision spatiale peut être obtenue en utilisant des gradients (non nuls) de u calculés à partir des valeurs de u aux centres des cellules voisines [49][92].

4.9 Conditions aux limites

Pour résoudre l'équations (4-34), nous devons définir des conditions aux limites. Les solutions de chaque cellule dépendent fortement des solutions des cellules voisines, notamment en raison de l'écoulement entre elles. Cependant, les cellules de frontière du domaine numérique doivent faire l'objet d'une attention particulière. Nous devons connaître ou calculer les flux à ces frontières en utilisant les valeurs du domaine de calcul et d'autres informations qui représentent les conditions aux limites [93].

Il existe deux types principaux de conditions aux limites qui sont couramment utilisés dans les calculs numériques. Il s'agit des conditions suivantes

- Conditions de Dirichlet : Cette condition fixe la valeur du champ considéré à la frontière.
- Conditions de Neumann : Cette condition fixe la valeur du gradient du champ considéré à la frontière.

En plus de ces conditions, d'autres conditions, telles que les conditions symétriques, sont également couramment utilisées. Il est important de noter qu'une atmosphère libre et ouverte est également considérée comme une condition.[4]

4.9.1 Condition limite transmissive (gradient Zéro)

La condition de gradient zéro signifie que le champ considéré est complètement développé et que $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ (ϕ ; ne change pas dans la direction n). Une manière simple de mettre en œuvre cette condition est d'imposer un gradient nul (dans la direction appropriée) pour ϕ à la frontière. Par exemple, $\frac{\partial p}{\partial x} = 0 \Big|_{x=L}$ c'est la pression de sortie nulle. Les conditions de valeur fixe ou de gradient nul sont connues sous le nom de conditions de Dirichlet ou de Neumann [94].

Ou d'une façon plus claire ; supposons que l'interface de la cellule (1/2, j) soit une frontière transmissive. En imposant un gradient zéro sur U (dans la direction i) à (1/2, j), la valeur dans la cellule fictive voisine (0, j) est simplement obtenue à partir de la cellule intérieure voisine (1, j). $u_{0,j} = u_{1,j}$ [91]

4.9.2 Condition au limite solide (pas d'écoulement)

Si l'interface de la cellule (1/2, j) se trouve sur une frontière solide. On distingue deux façons d'implémenter une condition de frontière solide

4.9.2.1 Méthode directe

Dans cette méthode, on impose les conditions aux limites de manière explicite dans le modèle, généralement en appliquant directement les valeurs de la condition aux points de la grille situés le long de la frontière solide. Par conséquent, à une frontière solide, $\vec{v} \cdot \vec{n} = 0$, où \vec{n} est un vecteur unitaire normal à la frontière. Ainsi, à l'interface cellule solide (1/2, j)

$$\vec{v}_{1/2,j} \cdot \vec{n}_{1/2,j} = 0 \quad (4-35)$$

Qui est équivalent à :

$$\vec{v}_{1/2,j} \cdot \vec{s}_{1/2,j} = 0 \quad (4-36)$$

Pour un système de volumes finis (SVF), nous devons évaluer le produit $\vec{H}_{1/2,j} \cdot \vec{s}_{1/2,j}$. Ce calcul est simplifié par (4-36).

Par exemple, dans l'équation d'advection linéaire $\vec{H} = U\vec{v}$ ainsi ;

$$\vec{H}_{1/2,j} \cdot \vec{s}_{1/2,j} = (u_{1/2,j} \vec{v}_{1/2,j}) \cdot \vec{s}_{1/2,j} = u_{1/2,j} \underbrace{(\vec{v}_{1/2,j} \cdot \vec{s}_{1/2,j})}_0 = 0$$

4.9.2.2 Méthode indirecte

La méthode indirecte également connue sous le nom de méthode des points fictifs, consiste à copier toutes les variables, à l'exception la vitesse, de la cellule intérieure voisine (1, j) dans la cellule fictive (0, j) et à traiter la vitesse de la manière suivante. Sachant que $\vec{v}_{1,j}$ dénote la vitesse dans la cellule (1, j) et écrivant-la comme la somme des vitesses normales et tangentielles à l'interface solide (1/2, j). Ces vitesses sont respectivement \vec{v}_n et \vec{v}_t . Alors :

$$\vec{v}_{i,j} = \vec{v}_n + \vec{v}_t \quad (4-37)$$

L'équation (4-37) nous a permet de distinguer deux cas particuliers :

*/ Cas1 ; pas de glissement sur paroi (No Slip Boundary) :

Ici, la vitesse sur la paroi ou frontière solide est nulle. Par conséquent, les composantes normale et tangentielle de la vitesse sont toutes deux nulles. Ceci signifie que la vitesse dans la cellule fictive est régie par la formule ci-après ;

$$\vec{v}_{0,j} = -\vec{v}_n - \vec{v}_t = -\vec{v}_{1,j} \quad (4-38)$$

Cela traduit par ; les particules fluides ne bougent plus et ils sont collés sur la paroi.

*/ Cas2 ; contrainte de glissement sur paroi (Slip Boundary) :

Le cas de présence de glissement sur paroi ou frontière solide, c'est la vitesse normale qui est nulle mais la vitesse tangentielle est inchangée car il n'y a pas de frottement. Cela suggère que la vitesse dans la cellule fictive est donnée par la formule suivante ;

$$\vec{v}_{0,j} = \vec{v}_t \quad (4-39)$$

L'explication de cette équation est la suivante ; les particules du fluide se déplacent le long de la paroi sans être soumises à aucune force de frottement.

4.10 Algorithmes de Couplage pression-vitesse

Nous souhaitons souligner que l'algorithme SIMPLE de Patankar (1980) a jeté les bases de plusieurs algorithmes distincts de couplage pression-vitesse. Parmi eux figurent les algorithmes SIMPLER et SIMPLEC. Cependant, dans cette thèse, nous présenterons exclusivement les algorithmes SIMPLE et PISO que nous avons utilisés pour nos simulations numériques. Cette décision est motivée par notre intention de maintenir une approche simple.

Dans le chapitre 3. Il est difficile de résoudre les équations de conservation de quantité de mouvement et de continuité simultanément pour les écoulements compressibles et incompressibles. En raison du coût de calcul élevé, une technique de résolution qui peut être utilisée une solution approximative en résolvant chaque équation de transport séparément (appelée approche ségréguée ou séparée) sera utilisée. [93]

Pour ce faire, une équation de pression doit être dérivée. L'équation de conservation de quantité de mouvement peut être exprimée sous une forme semi-discrétisée comme suit :

$$K \cdot U = -\nabla p \quad (4-40)$$

Avec K est une matrice $[n \times n]$ des coefficients pour les n cellules. Pour chaque direction i liée à x_i :

$$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \dots & K_{1n} \\ K_{21} & K_{22} & \dots & K_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ K_{n1} & K_{n2} & \dots & K_{nn} \end{pmatrix} \cdot [U_{x_{i1}} \quad U_{x_{i2}} \quad \dots \quad U_{x_{in}}]^T = \left[\frac{\partial p}{\partial x_{i1}} \quad \frac{\partial p}{\partial x_{i2}} \quad \dots \quad \frac{\partial p}{\partial x_{in}} \right]^T \quad (4-41)$$

Les valeurs à l'intérieur des cellules peuvent être séparées des valeurs voisines :

$$K \cdot U = B \cdot U - F(U) \quad (4-42)$$

Avec B la matrice des coefficients de la cellule (i,i) et $H(U)$ la matrice des coefficients des cellules voisines et des termes sources. B est une matrice diagonale par définition dont elle peut être inversée facilement. Par conséquent :

$$U = B^{-1}F(U) - B^{-1}\nabla p \quad (4-43)$$

Avec F un opérateur qui est défini comme suit :

$$F(U) = B \cdot U - K \cdot U \quad (4-44)$$

Introduisant Alors la compressibilité qui est dénotée par ψ dont on peut la tirer de l'équation suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \psi \frac{\partial p}{\partial t} \quad (4-45)$$

Par remplacement du terme $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ par le terme $\psi \frac{\partial p}{\partial t}$ dans l'équation de continuité du chapitre 3 on about à la formule suivante :

$$\psi \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \left(\rho (B^{-1} F(U) - B^{-1} \nabla p) \right) = 0 \quad (4-46)$$

Par réorganisation des termes on about à l'équation de Poisson pour la pression :

$$\nabla \left(\rho B^{-1} \nabla p \right) = \psi \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \left(\rho (B^{-1} F(U)) \right) \quad (4-47)$$

Deux équations sont donc obtenues, l'une pour la vitesse (4.46) et l'autre pour la pression. Pour résoudre ces deux équations, il existe plusieurs algorithmes itératifs jusqu'à ce qu'une convergence soit atteinte.

4.10.1 L'algorithme SIMPLE

L'acronyme SIMPLE signifie *Semi-Implicit Method for Pressure- Linked Equations* (méthode semi-implicite pour les équations liées à la pression). L'algorithme a été proposé à l'origine par Patankar et Spalding (1972) et est essentiellement une procédure de déduction et de correction pour le calcul de la pression sur la grille en quinconce. La méthode est illustrée par l'examen des équations de l'écoulement laminaire bidimensionnel en coordonnées cartésiennes. [93] [95]

L'algorithme SIMPLE fournit une méthode de calcul de la pression et des vitesses. La méthode est itérative et lorsque d'autres scalaires sont couplés aux équations de la quantité de mouvement, le calcul doit être effectué de manière séquentielle. La séquence d'opérations dans une procédure CFD qui utilise l'algorithme SIMPLE est présentée à la figure 4.7.

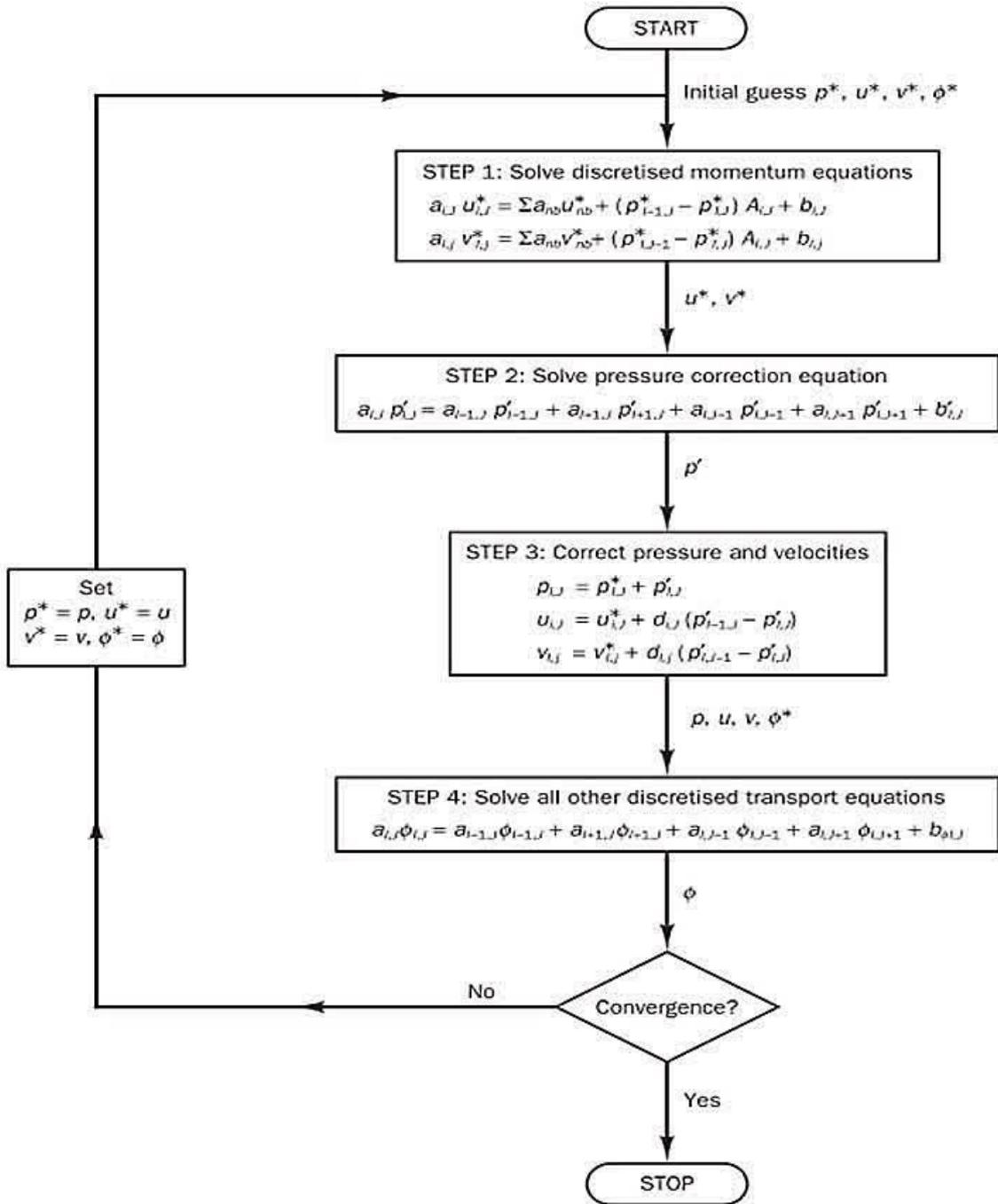


Figure 4-5 : Organigramme de l'algorithme SIMPLE[93]

4.10.2 L'algorithme PISO

L'algorithme PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) d'Issa (1986) est une procédure de calcul de la pression et de la vitesse développée à l'origine pour le calcul non itératif d'écoulements compressibles instables. Il a été adapté avec succès à la solution itérative de problèmes en régime permanent. PISO comprend une étape de prédiction et deux étapes de correction et peut être considéré comme une extension de SIMPLE, avec une étape de correction supplémentaire pour l'améliorer. [93]

Le schéma de couplage implicite pression-vitesse (PISO), qui fait partie de la famille d'algorithmes SIMPLE, est basé sur un degré supérieur de la relation approximative entre les corrections de pression et de vitesse. L'une des limites de l'algorithme SIMPLE est que les

nouvelles vitesses et les flux correspondants ne satisfont pas à l'équilibre de la quantité de mouvement après la résolution de l'équation de correction de la pression. Par conséquent, le calcul doit être répété jusqu'à ce que l'équilibre soit satisfait. Pour améliorer l'efficacité de ce calcul, l'algorithme PISO effectue deux corrections supplémentaires ; la correction du voisinage et la correction de l'asymétrie.

La figure (3-8) ci-après donne l'organigramme de fonctionnement de l'algorithme PISO.

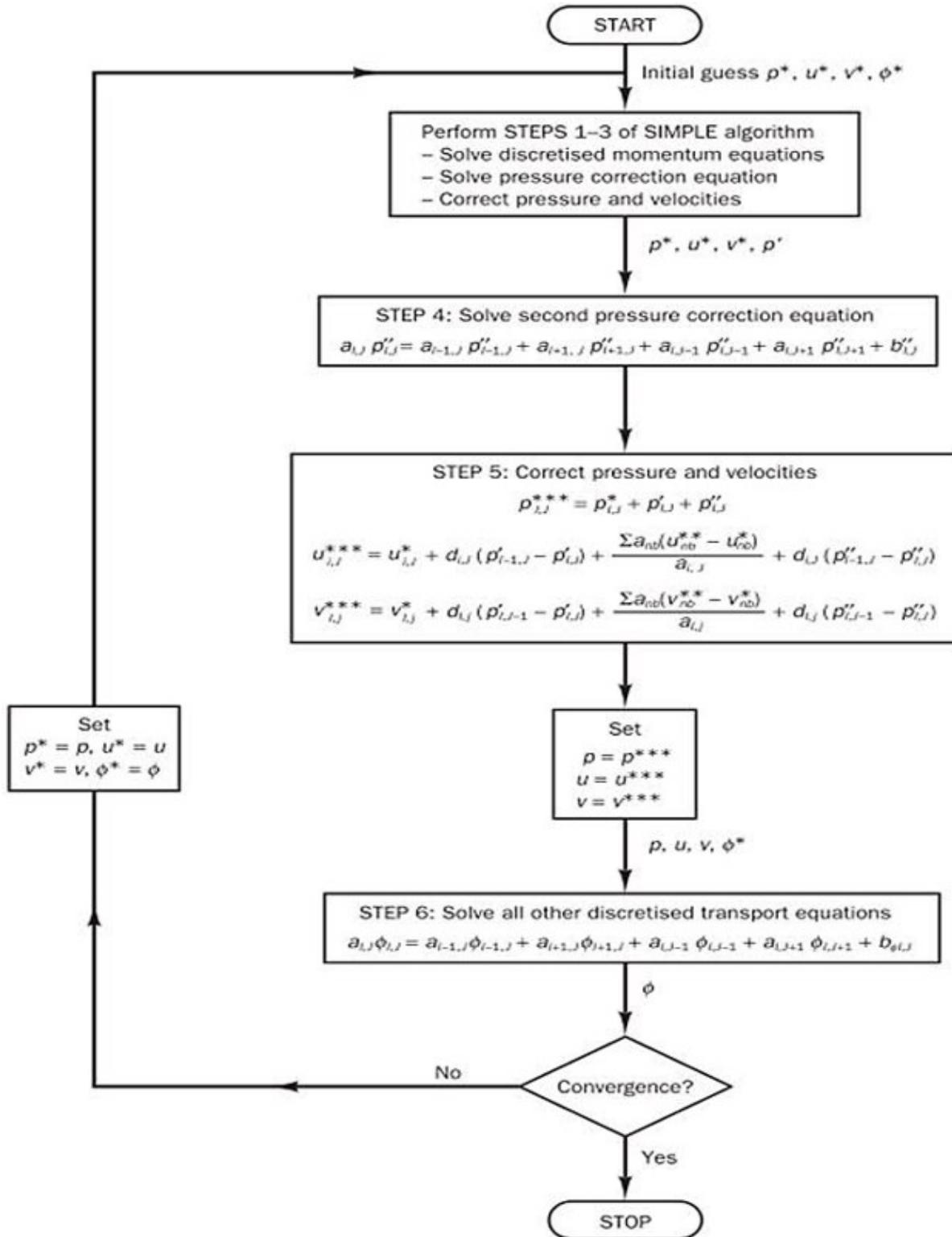


Figure 4-6 : Organigramme de l'algorithme PISO [93]

4.11 Discrétisation de termes sources

Les termes sources (puits et source) apparaissent dans les équations régissant de nombreux problèmes liés aux phénomènes d'écoulement et de transport. Les exemples incluent les équations des modèles de turbulence, les réactions chimiques, le transfert de chaleur par rayonnement, le transfert de masse et les écoulements multiphasiques, pour n'en citer que quelques-uns. Ces termes sources affectent non seulement la physique du problème, mais aussi la stabilité numérique des calculs. Cependant, s'ils sont correctement traités, les termes sources peuvent améliorer la robustesse. Une recommandation générale consiste à traiter les valeurs négatives (puits) de manière implicite, tandis que les valeurs positives (sources) doivent être évaluées de manière explicite. Le traitement des termes sources peut être clarifié en examinant la forme discrétisée de l'équation générale de conservation de la variable ϕ sur l'élément de centroïde C et de volume V_C avec une source explicitement affichée (Figure 4-7). Cette équation est donnée par :

$$\begin{cases} a_c \phi_c + \sum_{F_i(i=1)}^{N_{\text{coté}}(C)} a_F \phi_F = Q_C^\phi V_C \\ Q_C^\phi = Q(\phi_C) \end{cases} \quad (4-48)$$

Où $Q_C^\phi V_c$ représente le terme source intégré sur l'élément C.

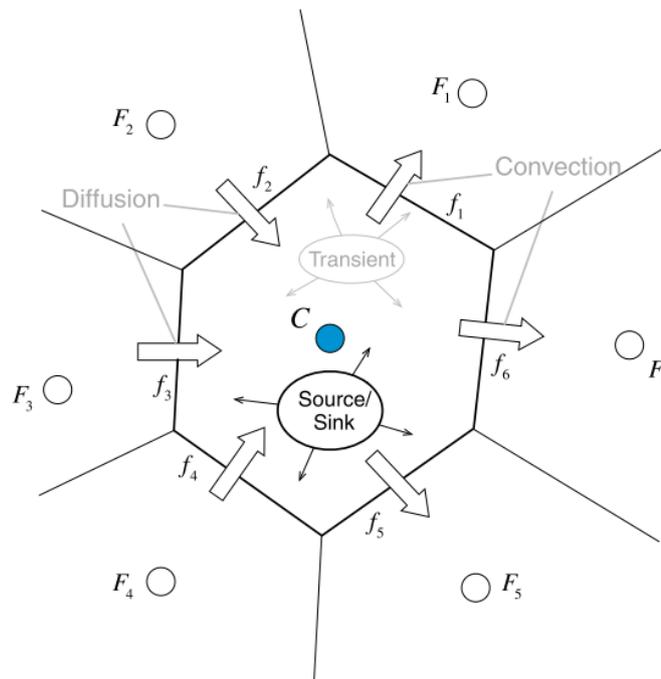


Figure 4-7 : Un élément de volumes finis avec terme source[65]

Une méthodologie itérative peut utiliser les données existantes de ϕ , qui représentent les valeurs obtenues lors de l'itération précédente, pour le calcul direct du terme source $Q_C^\phi V_c$. Bien que cette approche soit efficace lorsque le terme source $Q_C^\phi V_c$ reste constant ou présente des fluctuations mineures. Cependant, lorsque $Q_C^\phi V_c$ soumis à des variations significatives en comparaison avec d'autres variables de l'équation, cette méthode peut présenter une

convergence plus lente. Dans ce cas, des techniques de linéarisation, telles que l'utilisation d'un développement en série de Taylor, peuvent être employées pour accélérer le processus de convergence. La valeur actuelle du terme source peut être formellement exprimée sous la forme de l'équation (3-50) dont exposant * représente une itération précédente.

$$Q(\phi_C) = Q(\phi_C^*) - \left(\frac{\partial Q}{\partial \phi_C} \right)^* \phi_C^* + \left(\frac{\partial Q}{\partial \phi_C} \right)^* \phi_C \quad (4-49)$$

On peut écrire le deuxième terme de l'équation (4-49) comme suit :

$$\left\{ \begin{aligned} Q_C V_C &= \int_{V_C} Q^\phi dV \\ &= \int_{V_C} \left(\frac{\partial Q_C^*}{\partial \phi_C} \phi_C \right) dV + \int_{V_C} \left(Q_C^* - \frac{\partial Q_C^*}{\partial \phi_C} \phi_C^* \right) dV \end{aligned} \right. \quad (4-50bis)$$

Alors ;

$$Q_C V_C = \frac{\partial Q_C^*}{\partial \phi_C} \phi_C \cdot V_C + \left(Q_C^* - \frac{\partial Q_C^*}{\partial \phi_C} \phi_C^* \right) \cdot V_C \quad (4-51)$$

Substituant (4-50) dans l'équation (4-49) en posant $Flux_C = \frac{\partial Q_C^*}{\partial \phi_C}$ et

$Flux_V = \left(Q_C^* - \frac{\partial Q_C^*}{\partial \phi_C} \phi_C^* \right)$ on aboutit à l'équation algébrique suivante ;

$$[a_c - Flux_C] \phi_c + \sum_{F_i (i=)}^{N \text{ coté}(C)} a_F \phi_F = Flux_V \quad (4-52)$$

Dans cette formulation, il est impératif que la composante implicite du terme source, désignée par $Flux_C$, prenne une valeur négative afin de maintenir la dominance diagonale. Le non-respect de cette condition peut conduire à une violation potentielle du critère de Scarborough,[65] entraînant ainsi une divergence. En outre, si l'on considère le schéma dans lequel la variable ϕ est positive-définie, il devient essentiel que la partie explicite, représentée par $Flux_V$, prenne des valeurs positives afin de préserver la positivité des prédictions de ϕ .

4.12 Méthodes de relaxations de calcul

Les algorithmes itératifs utilisent un facteur de relaxation comme stratégie pour accélérer le processus de convergence, à condition qu'aucun signe de divergence ne soit identifié pendant les calculs. Ce facteur de relaxation sert comme paramètre de réglage de mise à jour de la solution itérative, influençant finalement la vitesse à laquelle l'algorithme converge vers la solution souhaitée.

Comme indiqué précédemment, le produit final du processus de discrétisation est un ensemble d'équations algébriques de la forme donnée par l'équation (4-51), dans laquelle a_F se réfère à un coefficient voisin (Figure 4-7) représentant l'effet de la variante voisine ϕ_F sur la

variable cellulaire ϕ_C . b_C est le côté droit de l'équation qui inclut généralement les termes sources, tandis que a_C est le coefficient principal de l'équation algébrique qui contient les effets de diverses influences, y compris les effets de discrétisation spatiale, les effets transitoires, ... L'ensemble d'équations représenté par l'équation. (4-51) est généralement prend une forme d'une matrice diagonale.

$$\begin{bmatrix}
 \bullet & & \circ & & \circ \\
 & \bullet & & \circ & \\
 \circ & & \bullet & & \circ \\
 \hline
 a_{F_1} & a_C & a_{F_2} & a_{F_3} & \\
 \hline
 & & \circ & \bullet & \circ \\
 \circ & \circ & & & \bullet \\
 & & \circ & & \bullet
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \\
 \\
 \\
 \phi_C \\
 \\
 \\
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \\
 \\
 \\
 b_C \\
 \\
 \\
 \end{bmatrix}$$

Figure 4-8 : Représentation matricielle de l'équation (3.51)

4.12.1 Méthode de sous-relaxation explicite

Dans l'approche de sous-relaxation explicite, après chaque itération, une nouvelle solution est trouvée et toutes les cellules du domaine de calcul sont vérifiées. La valeur anticipée de la variable ϕ_C^{predic} dans chaque cellule C est alors mise à jour selon la procédure suivante ;

$$\phi_C^{actuel} = \phi_C^{ancien} + \alpha^\phi \left(\phi_C^{predic} - \phi_C^{ancien} \right) \quad (4-53)$$

Où α^ϕ est le facteur de relaxation, qui, pour la relaxation explicite et implicite, et qui peut être interprété comme suit en fonction de sa valeur ;

1. $\alpha^\phi < 1$ entraîne une sous-relaxation. Cela peut ralentir la vitesse de convergence mais augmente la stabilité du calcul, c'est-à-dire que cela diminue la possibilité de divergence ou d'oscillations dans la solution.
2. $\alpha^\phi = 1$ correspond à l'absence de relaxation. Si elle est appliquée, les valeurs prédites au cours d'une itération sont celles utilisées à l'itération suivante.
3. $\alpha^\phi > 1$ conduit à une relaxation excessive. Elle peut parfois être utilisée pour accélérer la convergence, mais elle diminue généralement la stabilité des calculs.

4.12.2 Méthodes implicites de sous-relaxation

Lorsque la valeur de $\alpha^\phi < 1$, nous obtenons le schéma implicite. Le terme source est maintenant linéarisé.

4.12.2.1 Méthode de sous-relaxation de Patankar

Comme il a été indiqué, la solution itérative d'un système d'équations peut être sous-relaxée en introduisant un facteur de relaxation α^ϕ et exprimée par l'intermédiaire de l'équation

(3-54). Pour simplifier la notation utilisée avec la sous-relaxation implicite, l'équation (3-54) est modifiée en :

$$\phi_C = \phi_C^* + \alpha^\phi \left(\phi_C^{actuel} - \phi_C^* \right) \quad (4-54)$$

Où ϕ_C^* est la valeur de ϕ_C de l'itération précédente. Dans l'approche de relaxation de Patankar dans l'équation (4-53), ϕ_C^{actuel} est la nouvelle itération est remplacé par son expression équivalente dans l'équation suivante :

$$\phi_C = \phi_C^* + \alpha^\phi \left(\left(\frac{- \sum_{F_i(i=)}^{N_{coté}(C)} a_F \phi_F + b_C}{a_C} \right) - \phi_C^* \right) \quad (4-55)$$

Et par réarrangement des termes de l'équation (4-54) on trouve :

$$\frac{a_C}{\alpha^\phi} \phi_C + \sum_{F_i(i=)}^{N_{coté}(C)} a_F \phi_F = b_C + \frac{1 - \alpha^\phi}{\alpha^\phi} a_C \phi_C^* \quad (4-56)$$

Dans l'équation (4-55), l'inclusion du facteur de relaxation α^ϕ sert à ajuster à la fois le coefficient diagonal et le côté droit de l'équation, sans toutefois modifier la forme mathématique de l'équation elle-même. Avec la condition $\alpha^\phi < 1$, le facteur de relaxation renforce la dominance diagonale dans le système algébrique, ce qui augmente la stabilité du solveur linéaire itératif. Cela représente un avantage significatif par rapport à l'approche explicite.[89][92]

4.12.2.2 Méthode de relaxation du facteur E

La méthode du facteur E est une reformulation de la méthode de Patankar. Elle est dérivée de la réécriture de l'équation (4-51) sous la forme suivante :

$$a_C \phi_C = b_C - \sum_{F_i(i=)}^{N_{coté}(C)} a_F \phi_F \quad (4-57)$$

La sous-relaxation du 2^e membre de l'équation (4-56) est transformé à :

$$a_C \phi_C = \alpha^\phi \left(b_C - \sum_{F_i(i=)}^{N_{coté}(C)} a_F \phi_F \right) + (1 - \alpha^\phi) a_C \phi_C^* \quad (4-58)$$

En remplaçant le facteur de sous-relaxation α^ϕ dans l'équation (4-57) par $\frac{E_\phi}{1 + E_\phi}$ on aboutit à :

$$a_C \phi_C = \frac{E_\phi}{1 + E_\phi} \left(b_C - \sum_{F_i(i=)}^{N_{coté}(C)} a_F \phi_F \right) + \frac{1}{1 + E_\phi} a_C \phi_C^* \quad (4-59)$$

Qui peut être reformulée comme dans l'équation suivante ;

$$a_C \left(1 + \frac{1}{E_\phi} \right) \phi_C + \sum_{F_i(i=C)}^{N_{\text{coté}}(C)} a_F \phi_F = b_C + \frac{1}{E_\phi} a_C \phi_C^* \quad 4-60$$

Selon la formulation (4-59), l'effet de sous-relaxation peut être facilement interprété en termes d'échelle de temps transitoire ϕ_C qui avance à chaque itération de calcul. On peut montrer que le pas de temps Δt est proportionnel à l'intervalle de temps caractéristique Δt^* selon la formule suivante :

$$\begin{cases} \Delta t = E_\phi \Delta t^* \\ \Delta t^* = \frac{\rho_C V_C}{a_C} \end{cases} \quad (4-61)$$

Ici, ρ_C représente la densité du fluide dans la cellule C, qui possède un volume V_C . L'intervalle de temps caractéristique peut être compris comme la durée nécessaire à la diffusion et à la convection d'un changement de densité, noté ϕ_C , à travers le volume de l'élément. Ainsi, le facteur E_ϕ peut être considéré comme analogue au nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) associé à l'élément donné. [65]

La relation entre E_ϕ et α^ϕ est donnée par l'équation suivante :

$$E_\phi = \frac{1}{1 - \alpha^\phi} \quad 4-62$$

Généralement les valeurs de E_ϕ sont choisies entre 4 et 10, ce qui correspond à des valeurs comprises entre 0,75 et 0,9 pour α^ϕ .

4.13 Organigramme de résolution numérique des équations d'écoulement

Le diagramme ci-dessous illustre une illustration complète du processus itératif qui fait partie intégrante de la méthodologie de résolution. Pour parvenir à un calcul efficace de l'ensemble d'équations représentées à chaque pas de temps, la mise en œuvre nécessite l'exécution minutieuse de deux procédures. Qui sont, indispensables pour garantir la fidélité et la robustesse des simulations, nécessitent d'importantes ressources informatiques pour gérer les complexités associées à la résolution numérique.

- La génération de coefficients ou l'assemblage de sous-matrices élémentaires en une matrice de coefficients globale nécessite une procédure de calcul rigoureuse caractérisée par des calculs et une organisation des données précises. Ce processus est à la base de la construction des représentations discrètes indispensables à la résolution numérique des problèmes mathématiques et scientifiques.
- La résolution des équations linéaires résultantes à l'aide de méthodes algébriques. L'itération externe (pas de temps) pendant la solution est déterminée par l'échelle de temps physique ou le pas de temps pour le cas stationnaire ou erratique, respectivement. Dans le cas stationnaire, une seule itération interne (linéarisation) est

effectuée par itération externe, alors que dans le cas transitoire, plusieurs itérations internes sont effectuées par pas de temps.

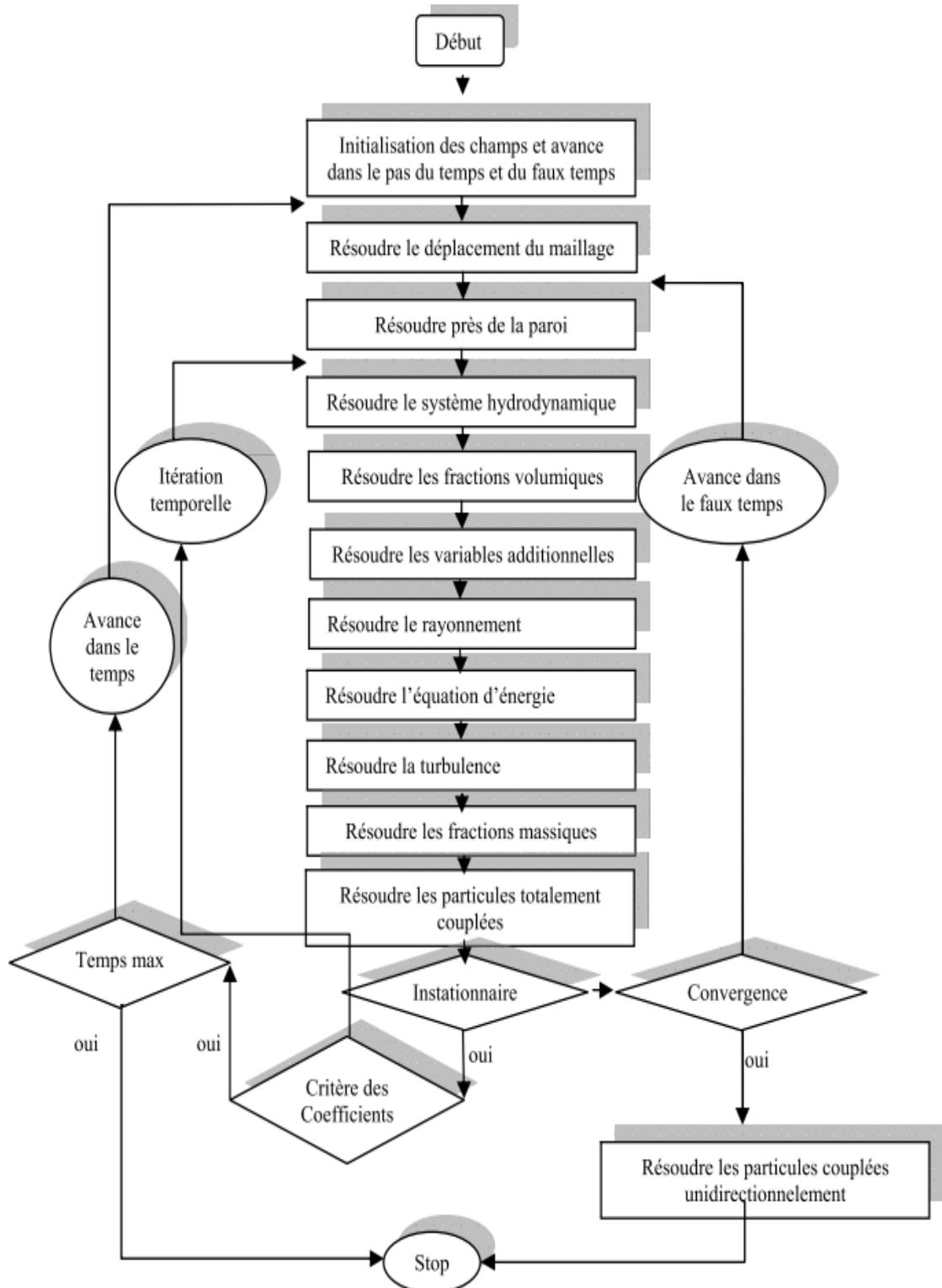


Figure 4-9 : Organigramme de résolution numérique des EDP[71]

4.14 Modélisation de la turbulence et de la chimie

Les variables thermochimiques de l'écoulement des fluides peuvent être prédites en résolvant les équations de Navier-Stokes pour le transfert d'énergie et d'espèces chimiques. Le

modèle RNG k- ϵ caractérise la turbulence et incorpore un nouvel élément $C_{\epsilon 3}$, dans l'équation de dissipation ϵ de Pope [39][96]. Ce phénomène permet de rectifier une surestimation causée par la dispersion radiale du jet circulaire provenant de l'injecteur annulaire. La caractérisation de l'état thermo-chimique immédiat est réalisée par l'utilisation de la fraction de mélange. Ce paramètre sert à la représentation d'un scalaire passif singulier, en supposant que les coefficients de diffusion sont uniformes pour toutes les espèces chimiques. Le terme "fraction de mélange" est défini formellement comme indiqué dans la référence [97].

Dans ce travail, au premier lieu on a utilisé le modèle de turbulence RNG-k- ϵ est utilisé pour déterminer le comportement de la turbulence mais par la suite on a utilisé le model SST-k- ω pour étudier le modèle URANS.

4.15 Maillage et conditions aux limites

L'objectif de cette section est de décrire un organigramme de la méthodologie numérique utilisée dans cette étude ainsi que les modèles numériques proposés par le solver ANSYS-Fluent. Nous décrirons également les étapes suivantes :

1. Etape de pre-processing : Dans le cadre de notre étude, nous avons employé un logiciel de prétraitement, à savoir le logiciel Pointwise[®] pour la génération de maillages, qui est une étape très importante dans la simulation numérique. Plus précisément, il permet de créer des maillages de haute qualité pour les géométries complexes en utilisant des méthodes avancées de discrétisation de la géométrie.
 - La création de la géométrie.
 - Le Maillage.
 - Définition des conditions aux frontières.
2. Etapes de résolution : La résolution numérique des équations aux dérivées partielles pour le phénomène physique étudié a été effectuée à l'aide du logiciel ANSYS Fluent. Cette étape de résolution consiste en plusieurs étapes :
 - Définition du problème : nous avons défini les conditions aux limites, les propriétés physiques, les modèles de turbulence et les paramètres numériques nécessaires pour décrire le phénomène physique étudié.
 - Implémentation du maillage et conditions aux limites : on a utilisé le maillage généré par le logiciel Pointwise[®] comme base pour la résolution numérique. Le maillage est importé dans ANSYS Fluent, vérifié sa qualité et ajusté les paramètres de maillage si nécessaire.
 - Pour assurer la convergence du résultat, il est important de spécifier les paramètres de résolution dès le début des calculs en utilisant des critères de la convergence. Cette étape est essentielle pour garantir la fiabilité et la précision des résultats obtenus. Pour que le processus soit le plus efficace possible et produise des résultats de qualité, il est essentiel de sélectionner soigneusement les paramètres pour chaque calcul. Cette approche méthodique permet de fournir des résultats de calcul qui respectent les normes les plus strictes en matière de précision et de fiabilité.

3. Etape de poste traitement (post-processing) : Pour garantir la précision des résultats de la simulation numérique, le traitement des résultats obtenus est une étape importante. Celle-ci consiste à analyser les données générées par la résolution numérique.

La figure (4-10) illustre synthétiquement les phases les plus essentielles de la résolution numérique d'un problème physique.

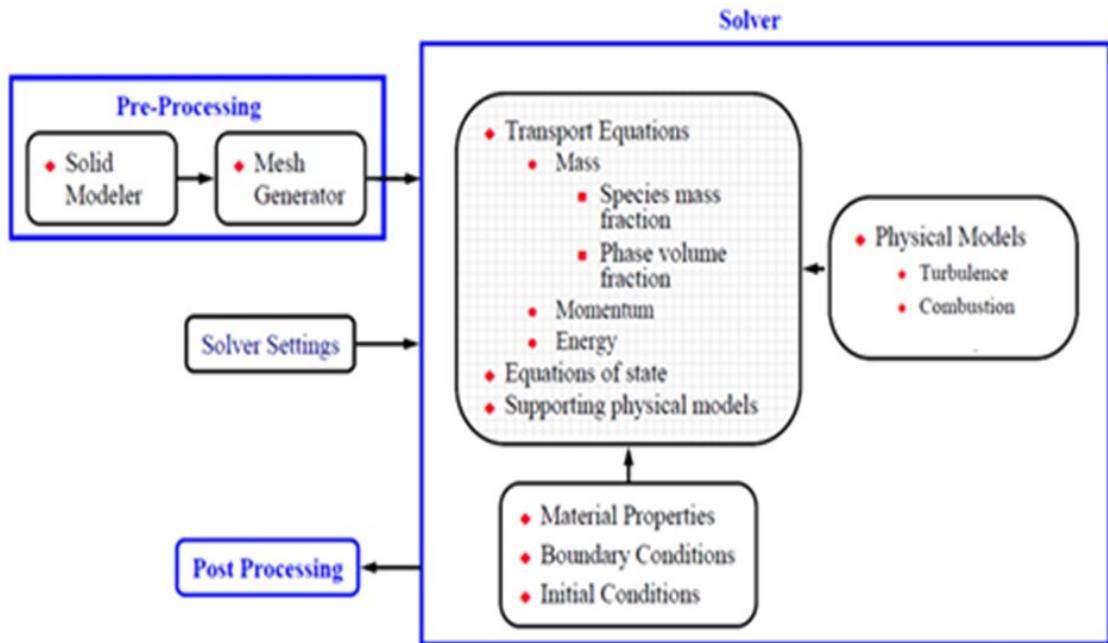


Figure 4-10 : Procédures de simulation

4.16 Schéma numérique utilisée

Cette recherche vise à analyser les mécanismes de combustion et les transferts thermiques dans d'une flamme de diffusion air-hydrogène (ou oxygène-hydrogène). La modélisation numérique est réalisée à l'aide du code de calcul Ansys-FLUENT, un outil de dynamique des fluides numérique (CFD) reconnu pour la simulation des écoulements complexes.

Les équations régissant ce processus sont l'équation de la quantité de mouvement, l'équation de l'énergie, l'équation du transport des espèces, les équations du modèle de turbulence et les équations de la réaction chimique. Nous avons résolu ces équations numériquement en utilisant l'approche des volumes finis, qui est une méthode numérique bien connue pour résoudre les équations aux dérivées partielles (EDP) dans la dynamique des fluides.

Les modèles de turbulence utilisés étaient les équations de Reynolds et de Navier-Stokes (RANS), qui sont largement utilisées pour modéliser les écoulements turbulents. Le schéma de réaction a été défini sur la base de la fonction de densité de probabilité (PDF) supposée, qui fournit une représentation statistique des processus turbulents de mélange et de réaction.

Le couplage des champs de vitesse et de pression s'effectue à l'aide de l'algorithme SIMPLE, un algorithme itératif basé sur la pression qui assure la conservation de la masse et le couplage pression-vitesse dans le champ d'écoulement.

4.17 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié la méthode des volumes finis, qui est une technique numérique utilisée pour transformer les équations différentielles qui régissent les phénomènes d'écoulement réactifs en équations algébriques. Cette méthode repose sur la division du domaine d'écoulement en un nombre fini de volumes de contrôle, chacun contenant une quantité spécifique de fluide. Les volumes de contrôle sont interconnectés par les frontières et les équations régissant l'écoulement sont discrétisées à l'aide de méthodes de différences finies ou d'éléments finis.

Nous avons discuté de la complexité de la résolution de l'interconnexion des équations, qui est une partie critique de la méthode numérique utilisée. L'interconnexion des équations découle des lois de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, qui déterminent le comportement du fluide. Le processus de discrétisation implique l'approximation des équations régissant l'écoulement en divisant le domaine en éléments discrets, ce qui permet la résolution numérique des équations.

En outre, nous avons examiné les principaux processus de discrétisation utilisés dans l'étude, notamment les méthodes centrées sur les cellules, centrées sur les sommets et à grille échelonnée. La méthode centrée sur les cellules consiste à placer les volumes de contrôle au centre de chaque cellule, tandis que la méthode centrée sur les sommets consiste à placer les volumes de contrôle aux sommets de chaque cellule. La méthode des grilles échelonnées est une combinaison des méthodes centrées sur les cellules et centrées sur les sommets.

Enfin, nous avons analysé l'algorithme responsable de la résolution globale, qui est la base conceptuelle fondamentale de l'approche numérique de l'étude des phénomènes d'écoulement, en particulier des écoulements réactifs. L'algorithme de résolution globale résout de manière itérative l'interconnexion des équations jusqu'à ce qu'il atteigne une solution stable.

Nous analyserons ensuite les résultats de la simulation d'une flamme à diffusion d'hydrogène. Notre analyse portera sur le comportement de la flamme dans des conditions stables et non stables. Cette étude vise à fournir une compréhension approfondie de son comportement à travers de multiples régimes de fonctionnement et événements transitoires.

Chapitre 5: Résultats et Discussion

5.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est consacré aux validation et discussion des résultats d'une investigation numérique pour un écoulement réactif, dans le but c'est d'étudier l'influence des conditions initiales (conditions d'injection) sur le comportement d'une flamme de diffusion turbulente de type hydrogène dont, le schéma réactionnel est basé sur la PDF présumée, le régime d'écoulement est indépendant du temps physique (régime stationnaire) pour un modèle de turbulence RANS. Et pour finir, une autre simulation est effectuée pour un régime d'écoulement instationnaire URANS dont les résultats finaux de cette dernière sont comparés avec ceux du RANS.

L'application des lois de conservation pour chaque volume de contrôle permet de calculer les variations des grandeurs physiques considérées à l'intérieur de chaque volume ainsi que les flux de ces grandeurs à travers les interfaces entre les volumes adjacents. Les flux à travers les surfaces de chaque volume de contrôle sont calculés à l'aide d'une approximation numérique. Bien que cette méthode permette ainsi de prendre en compte les interactions entre les différents volumes de contrôle, ce qui permet d'identifier les phénomènes physiques étudiées d'une manière plus précise.

Nous allons également décrire la méthodologie utilisée pour préparer le maillage, qui consiste à la création d'un maillage structuré, ainsi que le choix du type de maillage le plus approprié pour notre étude. Nous définissons les conditions aux limites qui sont des paramètres déterminants pour une simulation précise.

La résolution du système d'équations discrétisées est effectuée à travers des schémas numériques optimisés dans le code CFD. Les critères de convergence et les méthodes de validation sont implémentés pour assurer la robustesse et la précision de la solution numérique.

Enfin, nous allons faire une interprétation pour les résultats obtenus à partir des simulations numériques. Nous allons décrire comment nous avons analysé les données de simulation pour extraire les informations pertinentes, telles que les profils de vitesse, les distributions de pression et de température, ainsi que les taux de réaction. Nous allons également discuter des critères utilisés pour évaluer la précision des résultats et des limitations de la méthode de simulation numérique utilisée.

5.2 Description du problème

La géométrie utilisée dans cette étude est représentée par la figure (5.1), où l'on observe l'injection de deux jets coaxiaux dans une enceinte axisymétrique de diamètre $l=450\text{mm}$ les jets sont constitués d'oxydant qui s'agit de l'air (ou l'oxygène pour d'autres cas), le fuel qui est

l'hydrogène (H_2). Les deux éléments de combustions sont injectés à travers une conduite annulaire et une conduite centrale à des vitesses très distinctes d'une par rapport à l'autre.

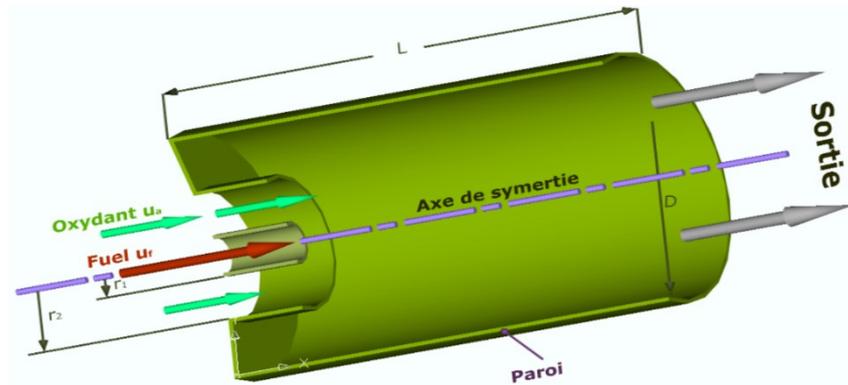


Figure 5-1 : Schéma de la chambre de combustion

Le système d'injection des fluides dans la chambre de combustion se compose d'une conduite annulaire injectant l'oxydant à une vitesse u_o et d'une conduite centrale injectant H_2 à une vitesse u_f .

Le modèle d'écoulement à deux jets coaxiaux est fréquemment employé pour simuler une flamme de diffusion dans un brûleur asymétrique. L'interaction entre les deux flux joue un rôle important dans l'efficacité de la combustion, en favorisant la diffusion moléculaire grâce à une augmentation de la surface de contact entre les réactifs. Cette diffusion moléculaire constitue un mécanisme clé qui déclenche les réactions chimiques.

En effet, la diffusion moléculaire peut être définie comme le mélange spontané de deux fluides différents en contact. Ce mélange est influencé par des facteurs tels que la viscosité, la densité et les différences de concentration des espèces impliquées. Lorsque les deux flux se mélangent, la différence de vitesse entre eux crée une zone de cisaillement qui entraîne des tourbillons et favorise la diffusion moléculaire.

5.3 Maillage et discrétisation du domaine d'étude

5.3.1 Discrétisation du domaine

Dans le domaine de la science tel que la physique. Les mathématiques ont connu plusieurs équations qui n'ont pas des solutions analytiques, c'est la raison pour laquelle on fait recourir aux méthodes numériques.

La simulation mathématique des processus d'écoulement d'un fluide et de transfert de chaleur engage la résolution numérique d'une série d'équations aux dérivées partielles.

5.3.2 Conditions aux limites (CL)

Les conditions d'entrée de la vitesse sont déduites à partir de données expérimentales tirées de [98]. Pour spécifier les conditions d'entrée de la vitesse, nous avons choisi une frontière axisymétrique sur l'axe du brûleur, tandis que pour les autres frontières, nous avons sélectionné des conditions de pression de référence prédéterminées ($10^5 Pa$) ainsi que les conditions sans glissement sur les parois qui est traduit par une vitesse nulle pour les particules fluides qui sont en contact avec les parois.

La figure ci-dessus illustre une configuration d'une chambre de combustion utilisée pour les simulations numériques du présent travail. Comme la figure l'indique, le combustible et l'oxydant s'introduisent dans la chambre de combustion suite un écoulement en mode co-courant. Dont, le combustible s'est introduit dans la chambre de combustion par un injecteur central $D=3,75$ mm, tandis que l'oxydant est injecté par un injecteur périphérique de rayon r_2 (figure (5-2)).

Bien qu'on doit signaler que le domaine de calcul s'étend jusqu'à $(480 \times 120) \times D$ dans les directions axiale et radiale.

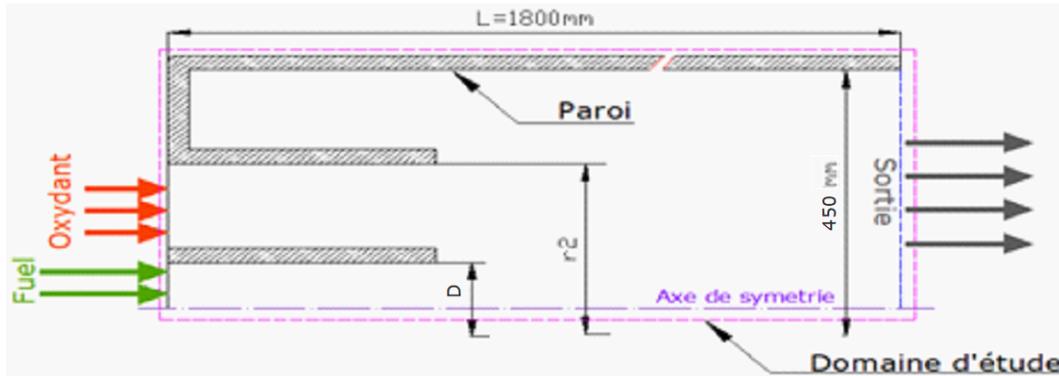


Figure 5-2 : Conditions aux limites (CL)

Afin d'évaluer l'indépendance du maillage et garantir la validité des résultats obtenus, quatre tailles de maillages distincts ont été créés et testés.

Le tableau présenté ci-dessous illustre les données qui concerne les conditions initiales de la simulation. Il convient de noter que, dans un premier temps, l'oxydant utiliser est l'oxygène.

Paramètres	Unité	Fuel (H_2)	Oxydant (O_2)
Température	T[K]	300	300
Vitesse d'écoulement	U[m/s]	296	1
Fraction molaire d'hydrogène	X_{H_2}	1	0
Fraction molaire d'oxygène	X_{O_2}	0	1
Fraction molaire de l'eau	X_{H_2O}	0	0
Fraction molaire d'azote	X_{N_2}	0	0

Table. 5-1: Table récapitulative des conditions initiales pour le cas H_2/O_2 .

5.3.3 Facteurs de relaxation et critères de convergence

Dans les considérations de minimiser le temps de calcul, il important de sélectionner un paramètre de relaxation qui minimise le nombre d'itérations nécessaires tout en conservant la stabilité de la solution.

Le meilleur choix de facteur de relaxation est celui qui est suffisamment petit pour assurer la stabilité, mais suffisamment grand pour faire converger le processus itératif à une vitesse convenable. Par exemple, si α est le facteur de relaxation, on distingue les cas suivants dont ils sont très influencés par α :

$< 0,15$ n'est pas conseillée car il provoque une grande ralentit dans les calculs.

$> 0,7$ peut rendre la résolution instable.

$> 0,9$ n'est pas recommandée car elle peut entraîner une divergence.

Pour une relaxation manuelle, il est recommandé de choisir le facteur de relaxation dans l'intervalle $(0,3 < \alpha < 0,7)$, conformément aux recommandations des références [74] et [91]. Le tableau ci-dessous présente les valeurs des facteurs de relaxation utilisées pour améliorer la convergence des calculs.

Variable	Valeur du facteur de relaxation
Champs de pression (P)	0.3
Vitesse (U)	0.7
K	0.3
Ω	0.3
Quantité de mouvement	0.7

Table. 5-2: Valeurs des facteurs de relaxation

5.4 Test de l'effet du maillage

Dans cette étude, une configuration axisymétrique est utilisée. La géométrie et la génération du maillage sont effectués par le préprocesseur Pointwise[®]. Le maillage généré est d'une forme structurée à des mailles de forme quadrilatérale. Le maillage est raffiné à la sortie de l'injecteur central et dans les zones de fort gradient de température ou qui représentent de forte réactivité entre le fuel et l'oxydant (figure (5-3)).

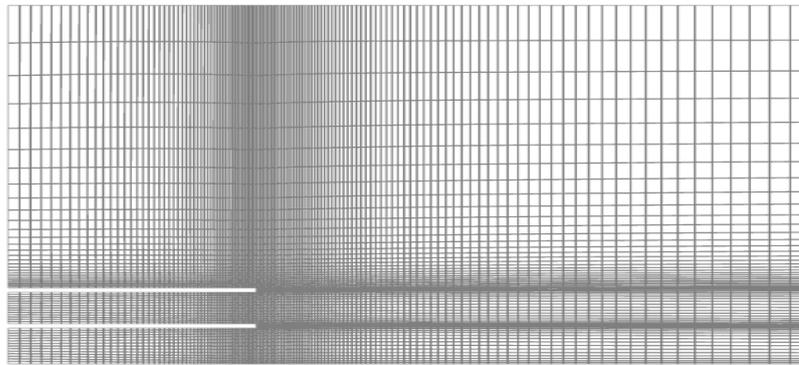


Figure 5-3: Modèle de maillage utilisé

Pour évaluer l'effet du maillage sur les différents paramètres, nous avons utilisé un maillage structuré 2D. Nous avons effectué des tests en utilisant quatre différentes tailles de maillage, à savoir 9752, 10512, 14442 et 16882 cellules. Ces tailles sont ensuite été comparées aux résultats expérimentaux obtenus par [99][100] et [101].

Pour évaluer l'influence du maillage sur le système, nous avons axé notre analyse sur les variations de température. Pour chaque configuration de maille, des graphiques ont été générés afin de visualiser les changements de température à travers le système. Ces représentations graphiques ont permis d'observer et d'analyser l'impact des différentes résolutions de maillage sur la distribution de température dans le domaine d'étude.

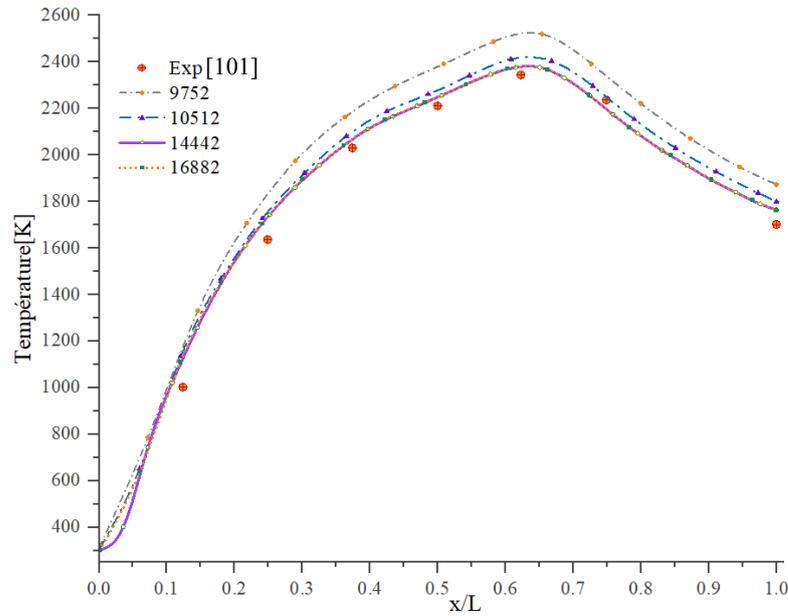


Figure 5-4 : Variation de la température en fonction de nombre de cellules de maillage (cas de l'air)

En analysant les graphiques de température obtenus pour quatre tailles de maillage différentes, il a été constaté que les variations de température dans les maillages de 10 512, 14 442 et 16 882 cellules ne présentent pas de différences statistiquement significatives. Toutefois, la comparaison avec les résultats expérimentaux a révélé certaines observations importantes. La configuration de maillage à 9 752 cellules se distingue par un écart plus marqué par rapport aux valeurs expérimentales, ce qui peut être attribué à une précision inférieure de cette configuration par rapport aux autres. En revanche, les maillages de 14 442 et 16 882 cellules affichent des performances similaires, sans différence notable entre eux.

Par conséquent, il est plus avantageux, du point de vue des coûts de calcul, d'utiliser le maillage de 14 442 cellules plutôt que 16 882 sans compromettre la précision des prédictions de calcul, telles que la température, la pression ou tout autre paramètre.

En tenant compte des informations précédentes, le maillage composé de 14 442 cellules apparaît comme le choix optimal en raison de sa concordance avec les résultats expérimentaux [98]. Cette configuration offre un niveau de précision satisfaisant pour l'analyse du phénomène étudié tout en réduisant la charge de calcul, permettant ainsi une utilisation plus efficace des ressources informatiques.

5.5 Discussion des résultats

L'un des aspects clés de l'interprétation des simulations numériques réside dans l'analyse des résultats issus de la dynamique des fluides numérique (CFD). Cette étape implique un examen attentif des données de simulation afin de mettre en évidence les écarts ou correspondances avec les données expérimentales. Il est important de souligner que des divergences peuvent survenir entre les résultats numériques et expérimentaux en raison de divers facteurs. Ces derniers incluent, entre autres, les hypothèses intégrées aux modèles numériques, les approximations effectuées lors de la simulation ou les limites inhérentes aux conditions de simulation. Par conséquent, une évaluation des résultats de la CFD est indispensable pour assurer la précision et la fiabilité des simulations.

La comparaison des résultats numériques avec les données expérimentales constitue une étape essentielle pour valider et évaluer la fiabilité des modèles CFD utilisés. Des écarts significatifs peuvent indiquer la nécessité d'ajuster les paramètres du modèle, d'optimiser les schémas numériques ou de revisiter les hypothèses initiales.

5.5.1 Etudes d'influence des conditions initiales

La considération des conditions initiales revêt une grande importance dans le calcul numérique de la dynamique des fluides (CFD) en raison de son impact significatif sur la précision et la fiabilité des simulations. Elles font référence aux variables d'un écoulement de fluide au début d'une simulation, y compris les paramètres tels que la vitesse, la pression, la température et la concentration. Ces conditions constituent le point de départ de l'analyse CFD.

Les caractéristiques de turbulence et la dynamique globale du système dont les conditions initiales imprécises ou inappropriées peuvent conduire à des résultats erronés. C'est pourquoi il faut veiller méticuleusement à ce que les conditions initiales soient représentatives du système physique réel. En outre, l'étude de la sensibilité des résultats à différentes conditions initiales permet de comprendre le comportement du système aux perturbations qui conduit à l'amélioration des capacités prédictives des simulations CFD.

5.5.1.1 Validation des résultats pour le cas de combustion hydrogène-Oxygène :

Le schéma réactionnel pour le cas H_2/O_2 qui a été décrit dans les recherches menées par [98] et [104] qui s'agit d'un mécanisme réactionnel composé de sept réactions élémentaires (comme indiqué dans le tableau table.(5-3))

	Réaction	A_j	β_j	E_j
1	$H_2 + O_2 = OH + OH$	0.170×10^{14}	0.0	48,151
2	$H + O_2 = OH + O$	0.142×10^{15}	0.0	16,401
3	$OH + H_2 = H_2O + H$	0.316×10^{08}	1.8	3030
4	$O + H_2 = OH + H$	0.207×10^{15}	0.0	13,750
5	$OH + OH = H_2O + O$	0.550×10^{14}	0.0	7000
6	$H + OH = H_2O + M$	0.221×10^{23}	-2.0	0,0
7	$H + H = H_2 + M$	0.653×10^{18}	-1.0	0,0

Table. 5-3 : Mécanisme réactionnel pour H_2/O_2 en état gazeuse [104]

Les profils de température dans la direction radiale sont présentés dans la figure (5.5). Ces profils ont été obtenus avec une prédiction numérique qui a été comparée à des mesures expérimentales qui sont effectuées aux différentes positions axiales comme dans [101] et [104].

5.5.1.1.1 Variation de la température selon la Direction radiale r/R_f :

Afin de prélever les valeurs de la température pour $x/L=1/8$, le graph est tracé pour $0 \leq r/R_f \leq 30$ dont $r/R_f=0$ correspond aux valeurs de la température sur l'axe de la chambre de combustion.

La figure 5-5(a) montre la distribution radiale de la température à $x/L=1/8$ dans la chambre de combustion met en évidence des disparités entre les données expérimentales et les approches numériques utilisant les modèles de turbulence RNG-k- ϵ et SST-k- ω . Les données expérimentales, considérées comme référence, montrent un pic de température de 1750K à $r/R_f = 5,4$. En revanche, les modèles de turbulence RNG et SST prédisent des valeurs

maximales proches (1752K pour RNG et 1819K pour SST), mais anticipent la position radiale du pic à $r/R_f = 3$ et 3,6, respectivement. Cette anticipation indique une surestimation du taux de mélange ou de la vitesse de réaction dans la région proche de l'injecteur. Par ailleurs, le modèle 'Predict'[102] surestime considérablement la température maximale (2000K) en déplaçant le pic en aval à $r/R_f = 8$, en suggérant une sous-estimation des pertes thermiques ou une surévaluation des cinétiques chimiques.

L'analyse comparative de la distribution radiale de température à $x/L = 3/8$ (figure 5-5(b)) révèle des divergences significatives entre les données expérimentales et les approches numériques. Dont, les modèles de turbulence SST-k- ω et RNG-k- ϵ montrent une bonne concordance avec les mesures, malgré une légère surestimation des températures axiales pour $r/R_f < 5$. En revanche, le graph 'Predict' de [102] surestime systématiquement la température, particulièrement dans la région périphérique pour $r/R_f > 15$.

De plus, en s'éloignant des injecteurs, dans le plan $x/L = 5/8$ (figure 5-5(c)), les températures calculées présentent une divergence par rapport aux résultats expérimentaux, variant de 130°C à $r/R_f = 0$ et 405°C pour $r/R_f = 27$. Cette divergence se réduit considérablement à la sortie de la chambre de combustion.

La Figure 5-5(d) montre que le modèle SST-k- ω suit très fidèlement les valeurs mesurées, en particulier pour $x/L < 5$, bien que, le modèle RNG-k- ϵ présente une légère sous-estimation de température, mais demeure assez proche des résultats expérimentaux. De manière générale, la température diminue en allant vers la sortie du brûleur, conformément aux prédictions des deux modèles. Cette comparaison indique que le modèle SST-k- ω offre une meilleure adéquation avec les données expérimentales, notamment pour les grandes valeurs de x/L .

En outre, il a été observé qu'aux positions $x/L = 1/8$ et $L = 3/8$ le modèle de turbulence RNG k- ϵ présente une bonne concordance avec les données expérimentales. Cependant, une divergence notable des résultats est observée en s'éloignant de la région d'injection vers la sortie de la chambre de combustion.

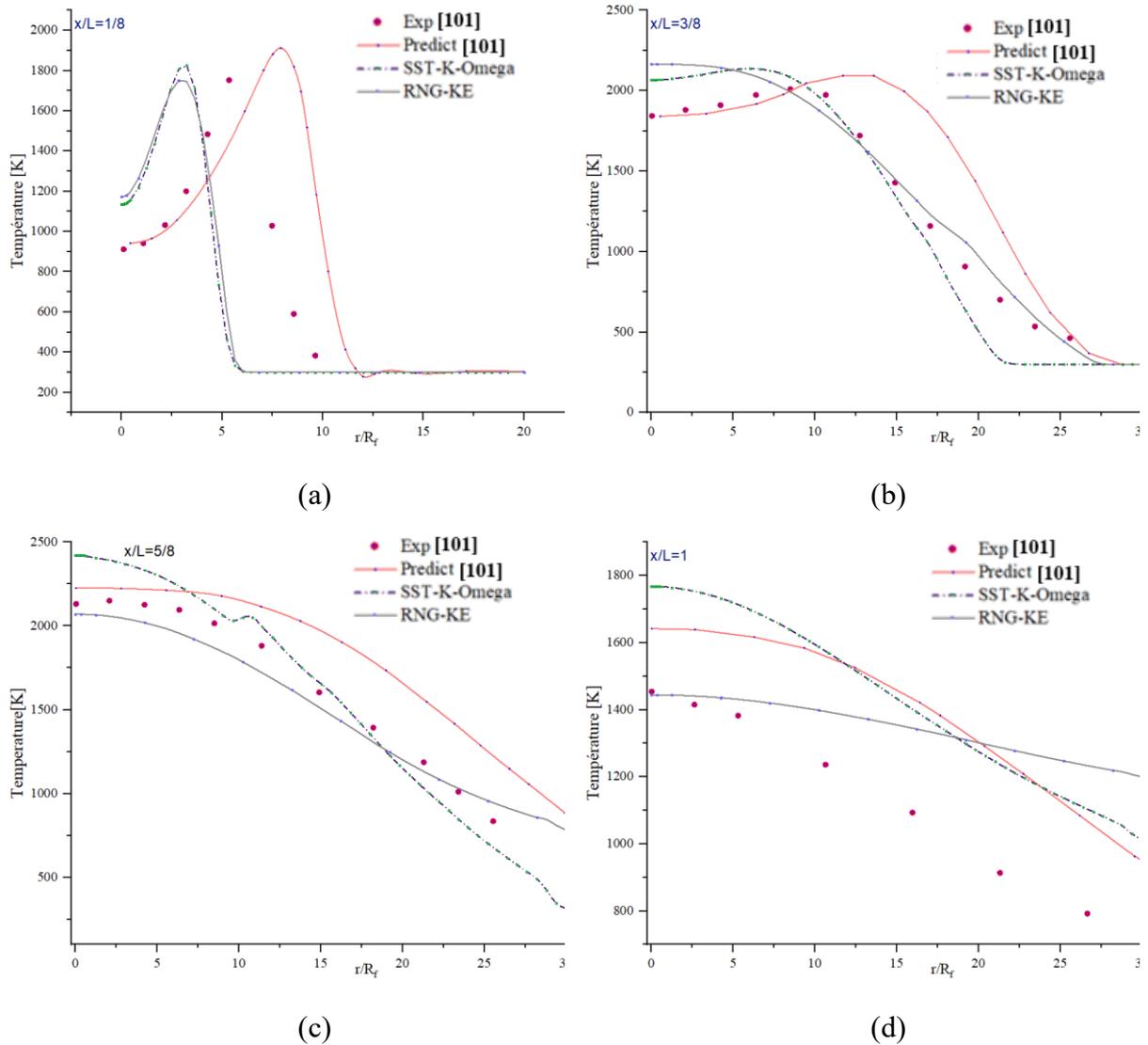


Figure 5-5: Représentation de la variation de température dans la direction radiale

En conclusion, le modèle numérique SST-k- ω démontre une performance remarquable dans la représentation de la flamme étudiée. Bien qu'il présente une légère surestimation des températures par rapport aux mesures expérimentales, il excelle dans la reproduction de la structure et de la position de la flamme. Cette conclusion est étayée par l'alignement des profils de la température simulés et expérimentaux. Ainsi, malgré les petits écarts quantitatifs en température, le modèle capture la distribution des phénomènes thermiques, offrant une représentation cohérente de la dynamique de la flamme dans le système analysé.

5.5.1.1.2 Variation des fractions massiques Y selon la Direction radiale r/R_f :

1. Fraction massique Y_{H_2} :

La figure (5-6) montre un contour quantitatif de la distribution de l'hydrogène Y_{H_2} dans une chambre de combustion. L'analyse de tracé des courbes de niveau, affirme que la région représentée par la couleur rouge présente une saturation maximale en hydrogène. Cela suggère qu'on est dans une zone de forte sortie d'hydrogène ou qui se trouve à proximité de la zone en question. Ensuite, Le spectre des couleurs passe de l'orange au bleu en s'éloignant radialement de cette zone, ce qui indique une diminution de la concentration d'hydrogène.

La densité des lignes de contour indique la vitesse de variation Y_{H_2} . Les contours très rapprochés indiquent des gradients abrupts de concentration d'hydrogène, tandis qu'un espacement plus large inspire une distribution plus uniforme.

La représentation spatiale de la concentration d'hydrogène est essentielle pour comprendre les schémas de mélange et la dynamique de la combustion. Elle sert de base empirique à l'optimisation des réactions de combustion, ce qui a des répercussions sur le rendement énergétique et la réduction des émissions.

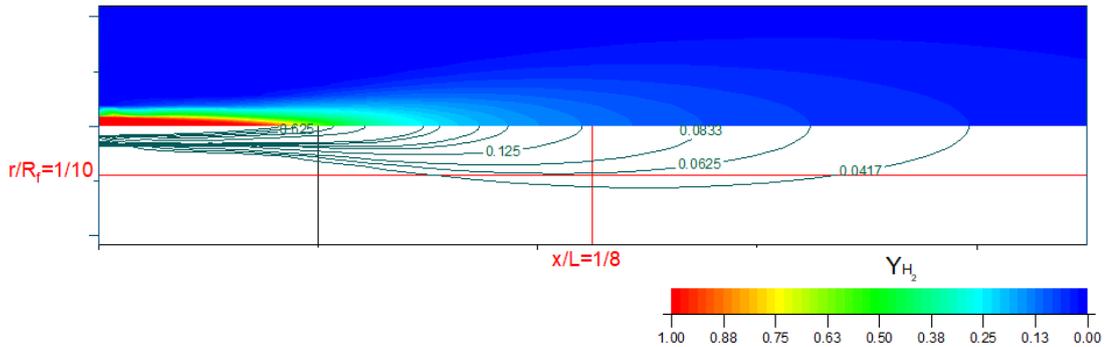


Figure5-6 : Représentation de la distribution d'hydrogène dans la chambre de combustion.

Les graphes représentés dans la figure (5-7) illustrent la distribution radiale de la fraction massique d'hydrogène Y_{H_2} à différentes positions axiales x/L sur l'axe principale d'une chambre de combustion, en particulier à x/L de $1/8$, $3/8$, $5/8$ et 1 . L'interprétation suivante synthétise les données représentées sur ces graphiques.

Dans la figure (a), à $x/L=1/8$, la fraction massique d'hydrogène Y_{H_2} diminue fortement selon la direction radiale en allant de la ligne centrale de la chambre de combustion vers sa paroi. Les données expérimentales inspirent qu'il y a une forte concentration de H_2 près de l'axe central, qui se diffuse rapidement dans tout l'espace de la chambre de combustion mais n'arrive pas à l'occuper totalement à cause de la combustion rapide qui lui subit.

En outre, près de l'axe de la chambre de combustion, le modèle 'Predict' initié par Y. H. Sehn [102] et Michel Coltrin [103] est parfaitement aligné aux données expérimentales effectuées par R. Barlow [98], bien que le graph 'Predict' présente une légère divergence plus loin de l'axe à des distances radiales relativement importantes.

En contrepartie, les modèles SST-k- ω et RNG-k- ϵ initiés dans notre étude suggèrent une sous-estimation de Y_{H_2} qui provoque une divergence remarquable.

La figure (b) présente la variation de Y_{H_2} à $x/L=3/8$, où elle diminue progressivement en remontant dans la direction radiale. Ici, les points de données expérimentales indiquent une distribution plus large de H_2 , potentiellement due à un mélange accru ou à un taux de réaction plus lent par rapport à la position à $1/8$. Le modèle 'Predict' de [102] reste en accord raisonnable avec les résultats expérimentaux. Cependant, les modèles SST-k- ω et RNG-k- ϵ ont toujours la tendance de sous-estimer la fraction massique d'hydrogène sur l'axe central, ce qui conduit à une divergence dans la modélisation de l'intensité de la zone de réaction centrale.

En outre, la comparaison entre les résultats illustrés dans la figure (a) et (b) et obtenus par les deux modèles de turbulence ; SST-k- ω et RNG-k- ϵ et ceux de l'expérience présentent une tendance cohérente entre eux en comparant leurs allures graphiques, ce qui a permis de bien

localiser les optimums des différents paramètres de la combustion mais en contrepartie, il est important de signaler que les valeurs de Y_{H_2} obtenues numériquement sont sous-estimées à un facteur de 40% près de l'axe principale ce qui peut affecter l'ingénierie de chambre de combustion en matière du rendement énergétique et consommation du fuel.

À $x/L=5/8$, le profil de fraction massique d'hydrogène (Y_{H_2}) s'aplatit significativement, révélant une distribution radiale plus uniforme. Le modèle 'Predict' sous-estime légèrement les valeurs de Y_{H_2} , probablement dû à des limitations dans la modélisation des réactions à ce stad. Cette divergence met en évidence le besoin d'améliorer la représentation des interactions chimie-turbulence et des réactions de recombinaison lorsque les gradients de concentration s'atténuent. L'affinement des paramètres cinétiques ou l'intégration de mécanismes réactionnels plus complexes pourrait accroître la précision du modèle dans ces conditions.

Dans cas de $x/L=1$ présenté en (d), la fraction massique de l'hydrogène est devenue très faible, ce qui signifie une consommation totale d'hydrogène et l'achèvement du processus de combustion. En outre, Les données expérimentales montrent un profil très plat, conduisant à la présence de quelques traces d'hydrogène résiduel dans la direction radiale. Bien que l'allure du modèle 'Predict' suit de près les données expérimentales, ce qui indique que ses hypothèses et ses calculs pour la phase d'achèvement de la réaction sont exacts.

Par conséquent, pour toutes les positions axiales, le modèle 'Predict' s'aligne de manière cohérente avec les données expérimentales, ce qui signifie son efficacité à capturer la physique essentielle qui régit la distribution de l'hydrogène dans la chambre de combustion. En revanche, les modèles SST- $k-\omega$ et RNG- $k-\epsilon$, bien qu'ils capturent qualitativement la tendance générale du processus de combustion, ils se divergent quantitativement aux résultats expérimentaux ce qui provoque un besoin potentiel de recalibrer des paramètres de turbulence et de cinétique de réaction, cette dernière qui est représentée par la PDF présumée. Ces résultats soulignent l'importance d'une modélisation précise pour prédire le comportement des espèces combustibles dans une flamme, ce qui est très important pour la conception et l'optimisation des systèmes de combustion en vue d'améliorer les performances et de réduire les émissions de polluants.

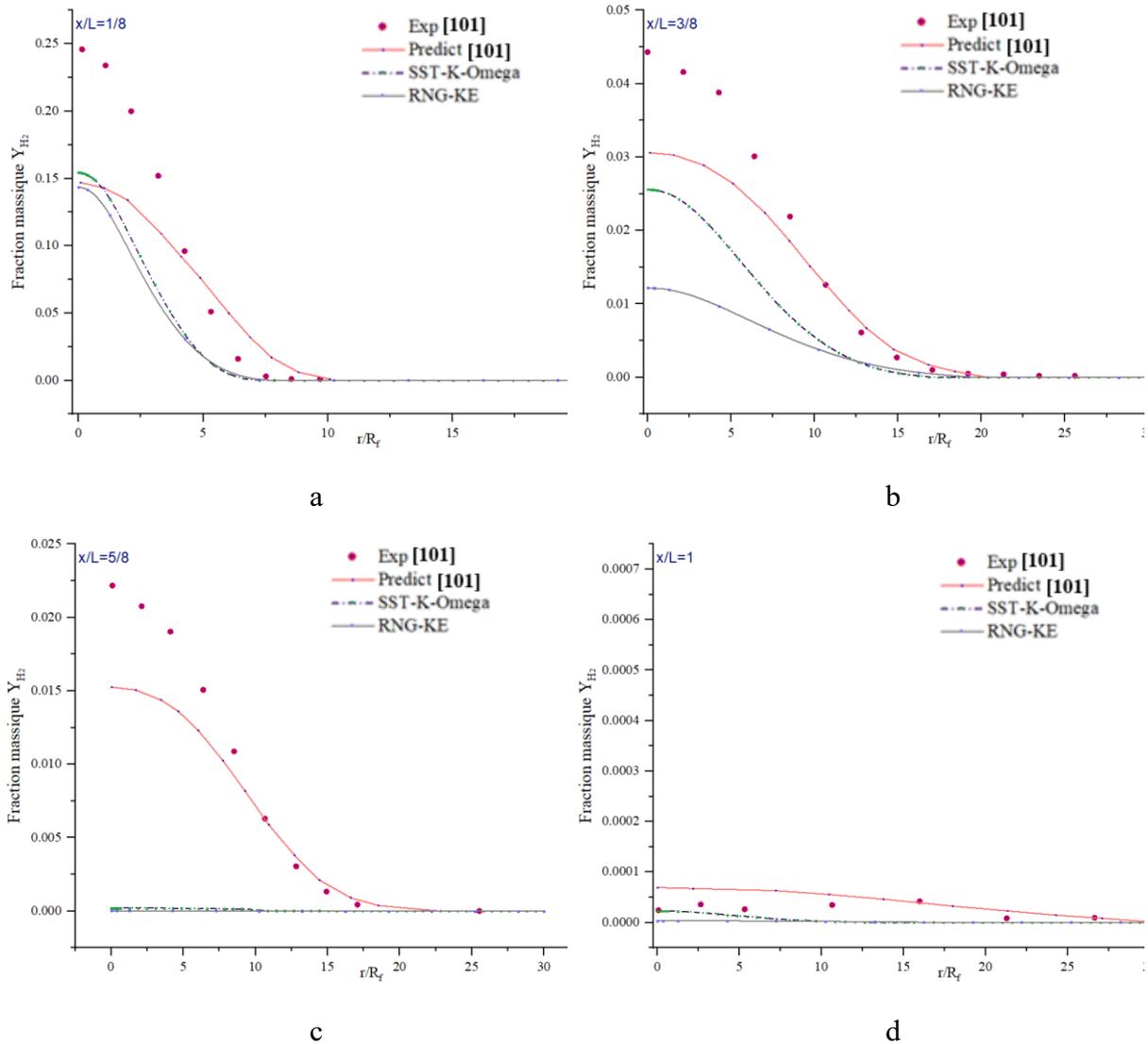


Figure 5-7 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{H_2} dans la direction radiale

2. Fraction massique Y_{O_2} :

La figure (5-8) montre un tracé de contour de la distribution de l'oxygène Y_{O_2} dans la chambre de combustion.

Le gradient de couleur vari du bleu pour indiquer une faible concentration d'oxygène allant au rouge pour une forte concentration, dont, la légende indiquant les valeurs de la fraction massique d'oxygène Y_{O_2} qui varie de 0,000 à 0,2340. Par ailleurs, le graph montre une variation de concentration d'oxygène distinct du centre vers la paroi, dont les valeurs les plus faibles sont enregistrées près de l'axe centrale (bleu foncé) et des valeurs plus élevées en rouge sont proches des parois.

Par ailleurs, la figure (5-8) montre que la fraction massique de l'oxygène Y_{O_2} est devenue de plus en plus importante qu'on s'éloigne de l'axe central du brûleur. Bien que. Les valeurs de Y_{O_2} les plus élevées sont observées en allant vers la sortie de la chambre de combustion telles que 0,1463 à $x/L = 5/8$ et 0,2048 près de la sortie.

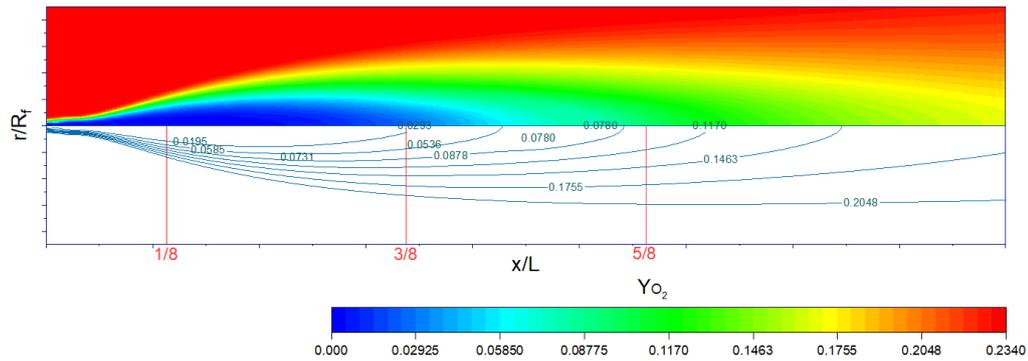


Figure 5-8 : Représentation de la distribution d'oxygène dans la chambre de combustion

Les graphiques de la figure (5-9) montrent comment la fraction massique d'oxygène Y_{O_2} varie dans la direction radiale de la chambre de combustion à différentes positions axiales x/L pendant le processus de combustion. Ces courbes montrent clairement la manière dont l'oxygène est consommé et distribué au cours du processus de combustion. Les sous-figures (a), (b), (c) et (d) comparent les résultats expérimentaux et numériques pour ces variations. En analysant ces graphiques, plusieurs conclusions importantes peuvent être tirées :

La figure (a) montre les graphiques des variations de la fraction massique de l'oxygène Y_{O_2} dans la position $x/L=1/8$, pour $0 \leq r/R_f \leq 5$ au voisinage de l'axe principal de la chambre de combustion, on constate qu'il y a une diminution notable de Y_{O_2} . Bien que les données expérimentales montrent que l'oxygène est consommé rapidement dans cette région de la chambre, ce qui est dû aux fortes réactions qui sont envisagées par le processus de combustion. En outre, la comparaison des graphiques des modèles SST-k- ω et RNG-k- ϵ avec les données expérimentales montre un bon accord entre ces modèles numériques et l'expérience.

La figure (b) illustre les graphes pour $x/L=3/8$ montre que plus on avance dans la direction axiale de chambre de combustion, plus la fraction massique d'oxygène diminue, bien que cette diminution soit inversement proportionnelle au r/R_f aussi. Cela pourrait indiquer que le front de flamme qui s'étend radialement conduisant à une consommation plus uniforme du O_2 à travers le rayon. En outre, le modèle présenté par 'Predict' montre une bonne concordance avec les données expérimentales, mais en revanche les modèles SST-k- ω et RNG-k- ϵ s'écartent davantage en particulier dans la plage $0 \leq r/R_f \leq 7,5$.

De plus, une distribution radiale plus homogène de Y_{O_2} est observée pour la position axiale $x/L=5/8$ illustrée dans la figure (c). Ce graph suggère une flamme mature où la plupart de l'oxygène proche du centre a été consommé dont une quantité d'oxygène résiduel subissant une réaction plus lente. La comparaison des résultats des prédictions numériques pour les modèles SST-k- ω et RNG k- ϵ indiquent une sous-estimation plus marquée, en particulier dans la région centrale de la flamme. En se rapprochant de la position $x/L=1$ qui signifie la sortie de chambre de combustion dont, les données expérimentales restreignent l'évolution de la fraction massique Y_{O_2} en allant dans la direction radiale, ce qui indique que la zone de réaction vient de se rétrécir et la consommation de l'oxygène s'est diminuée graduellement.

En outre, des remarques qui sont assez importantes concernant la fidélité des modèles numériques adoptés dans cette étude au résultats expérimentaux conduite aux constatations suivantes ; plus qu'on allant vers la sortie de la chambre de combustion, les modèles SST-k- ω

et RNG-k- ϵ présentent une divergence plus significative, ce qui pourrait être une indication que ces modèles sont moins précis au-delà de $x/L \geq 3/8$.

Par conséquent, la fraction massique d'oxygène Y_{O_2} , telle que représentée dans les graphiques de la figure (5-9), met en évidence les schémas de consommation de l'oxygène au cours du processus de combustion. Les modèles SST-k- ω et RNG-k- ϵ parviennent à saisir la tendance générale, mais présentent des écarts notables par rapport aux données expérimentales. Ces divergences suggèrent qu'un affinement de la modélisation de la turbulence ou une meilleure intégration de la cinétique chimique est nécessaire pour obtenir des prédictions plus précises et mieux alignées sur les observations expérimentales.

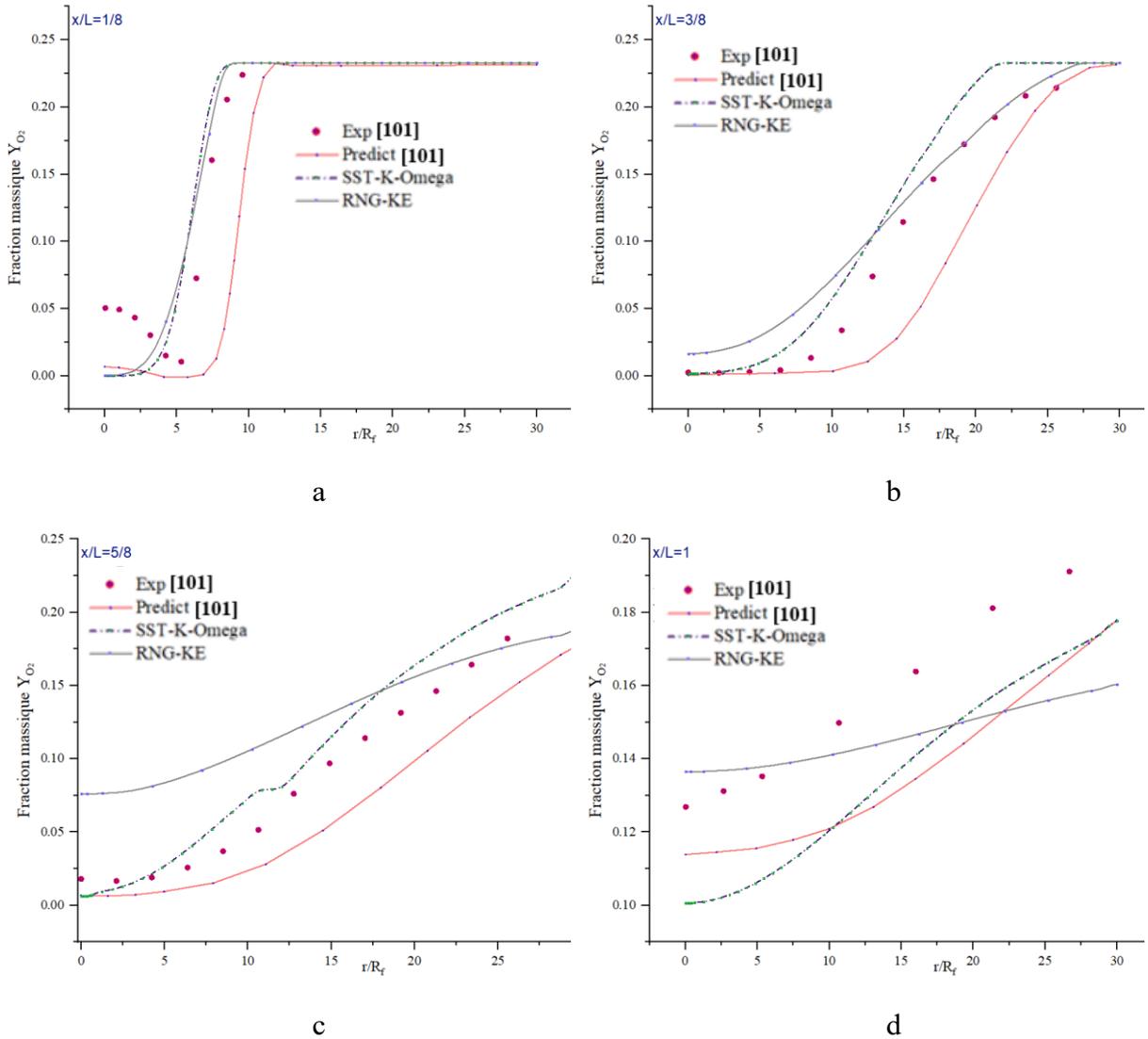


Figure 5-9 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{O_2} dans la direction radiale

3. Fraction massique Y_{H_2O} :

Les graphiques de la figure (5-10) représentent la fraction de masse d'eau Y_{H_2O} dans la direction radiale pour des différentes positions axiales x/L dans la chambre de combustion, comme indiqué par les rapports x/L de 1/8, 3/8, 5/8, et 1. Ces graphiques comparent les données expérimentales (marquées comme 'Exp') effectués par [104] et [105] confirmés par [98] avec des divers modèles de dynamique des fluides numérique, à savoir le model 'Predict', 'SST-k- ω ' et 'RNG-k- ϵ '.

La direction radiale est normalisée par le rayon de l'injecteur d'hydrogène (R_f). Cette normalisation permet de comparer les profils indépendamment des tailles absolues de la flamme ou de la concentration en eau.

L'analyse de la fraction massique d'eau est présentée dans les différents graphiques de la figure (a) pour la position $x/L=1/8$. Le profil expérimental 'Exp' commence à une valeur de $Y_{H_2O}=0,2$ pour $r/R_f=0$, puis montre une augmentation continue jusqu'à une valeur maximale $Y_{H_2O}=0,25$ à $r/R_f=6$, suivi d'une diminution jusqu'à $Y_{H_2O}=0$ sur les parois. Bien que le modèle RNG k- ϵ , débute à $Y_{H_2O}=0,22$ pour $r/R_f=0$ et atteint sa valeur maximale de 0.23 à $r/R_f=5$, ensuite, à $r/R_f=8$ Y_{H_2O} s'annule carrément en indiquant l'absence du H_2O . Cette diminution est attribuée à la consommation des réactifs et à l'achèvement de la réaction de combustion. Par ailleurs, il est intéressant de noter que le modèle SST-k- ω suit une tendance similaire à celle du modèle RNG k- ϵ , indiquant une cohérence globale dans la prédiction des profils de fraction massique d'eau, bien que des écarts mineurs existent par rapport aux données expérimentales.

Pour $x/L=3/8$, la comparaison des données expérimentales aux modèles numériques (SST-k- ω et RNG-k- ϵ). Les données expérimentales révèlent une fraction d'eau initialement élevée $Y_{H_2O} \approx 0,25$ décroissant jusqu'à zéro au-delà de $r/R_f=20$, reflétant la consommation d'oxygène et la formation d'eau dans la combustion, tandis que le SST-k- ω suit mieux les tendances expérimentales, avec une légère surestimation dans la région de décroissance. Le RNG-k- ϵ présente une sous-estimation de la fraction d'eau au centre mais converge aux données expérimentales en périphérie.

Pour $x/L=5/8$, une divergence est apparue entre les données numériques et expérimentales, suggérant une limitation potentielle ou une divergence dans les capacités prédictives des modèles adoptés. Bien que, la fraction massique d'eau Y_{H_2O} décroît sur l'axe de la chambre de combustion ($Y_{H_2O} \approx 0,25$) à presque 0 en périphérie ($r/R_f > 20$). Le modèle 'Predict' surestime cette fraction sur toute la plage, tandis que le modèle SST-k- ω suit étroitement la tendance expérimentale, avec une légère surestimation dans la zone intermédiaire. Bien que le modèle RNG-k- ϵ sous-estime initialement la fraction massique au centre, mais se rapproche des données expérimentales en périphérie.

Pour $x/L = 1$, la fraction massique d'eau est plus faible, débutant à 0,12 au centre et décroissant jusqu'à 0,04 en périphérie, indiquant une combustion complète. Le modèle 'Predict' surestime systématiquement la fraction massique de l'eau en comparant avec les valeurs expérimentales. Le modèle RNG-k- ϵ montre une bonne correspondance dans la région centrale et rejoint les valeurs expérimentales vers la périphérie, tandis que le modèle SST-k- ω est au-dessus des données expérimentales.

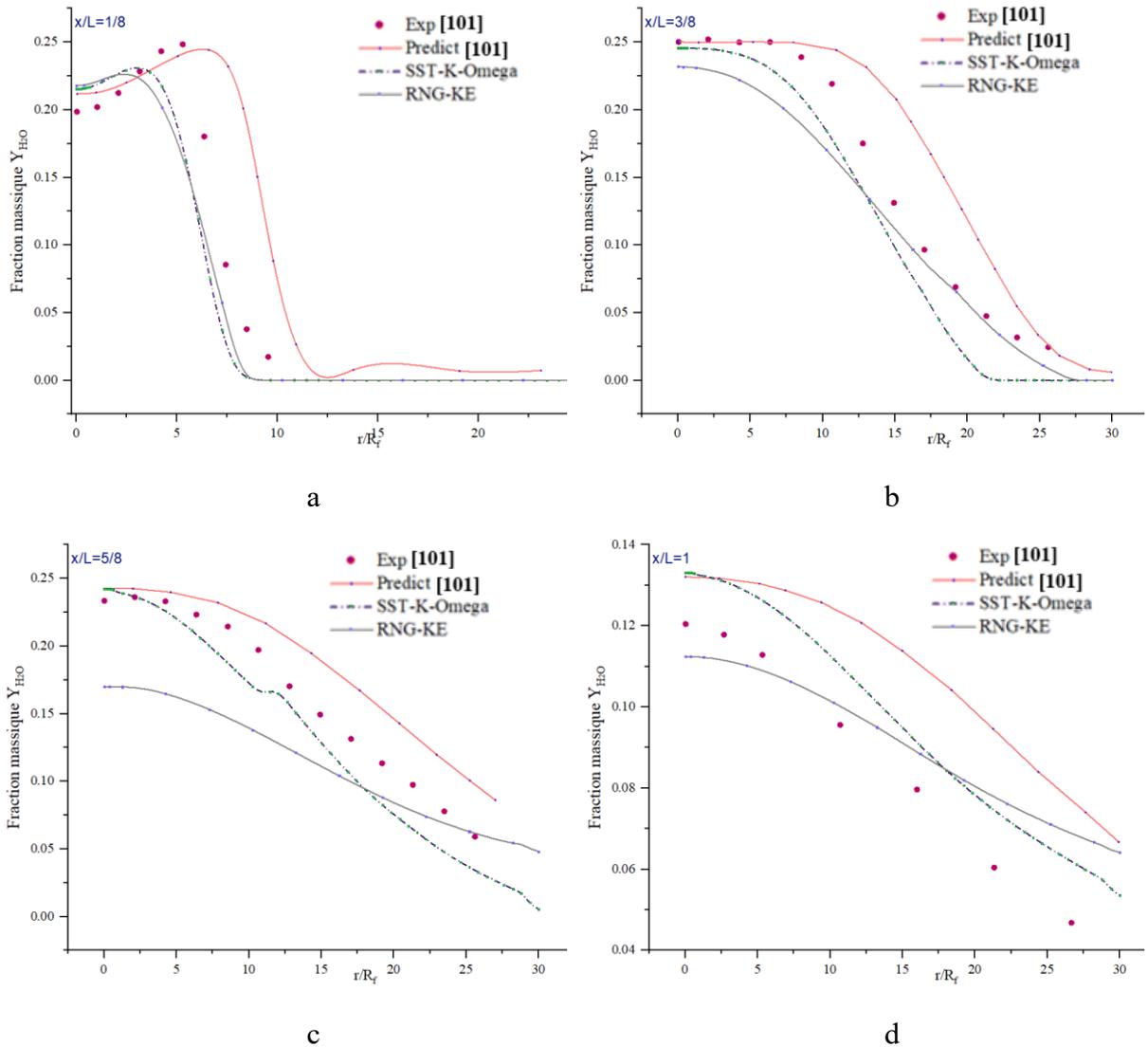


Figure 5-10 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{H_2O} dans la direction radiale

4. Fraction massique Y_{OH} :

Le tracé de contour illustré dans la figure (5-11) ci-après, représente la distribution axiale de la fraction de masse Y_{OH} pour l'hydroxyle OH dans un domaine de combustion aux différentes positions axiales x/L pour une flamme hydrogène-oxygène. Les valeurs x/L , étiquetées 1/8, 3/8, 5/8 et 1, correspondent aux différents points sur la longueur de la chambre de combustion.

La position radiale r/R_f est représenté sur l'axe des ordonnées, représentant la distance par rapport à la ligne centrale de la flamme. Le gradient de couleur représente la fraction de masse de OH. Le graphique montre que la concentration de l'hydroxyle OH n'est pas uniforme à travers la position radiale mais elle varie dans la direction axiale et radiale au même temps.

Le profil de la flamme illustre l'évolution dynamique de la fraction massique d'hydroxyle (OH). On observe une augmentation progressive de sa concentration de $x/L = 1/8$ à $3/8$, traduisant le démarrage et l'intensification de la combustion. La zone comprise entre 0.35 et 0.55 selon x/L , notamment près de l'axe central ($r/R_f=0$), présente une concentration en OH particulièrement élevée. Puis, lorsque la flamme s'étend jusqu'à $x/L = 5/8$, la concentration du OH diminue significativement ($Y_{OH}=2.6 \times 10^{-4}$), indiquant l'épuisement des réactifs. Enfin, à x/L

= 1, une réduction marquée du OH est constatée sur tous le rayon, signalant la fin de réaction avec seulement des traces subsistantes, symbole d'achèvement de combustion.

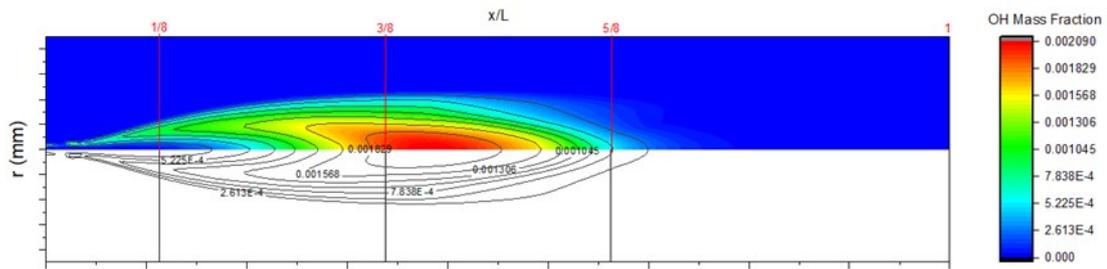


Figure 5-11 : Représentation de la distribution de la fraction massique de Y_{OH} le long de x/L

Les graphiques de la figure (5-12) illustrent la variation radiale de la fraction de masse Y_{OH} de l'hydroxyle (OH) à différentes positions axiales dans la chambre de combustion. Les résultats prédits ont été comparés aux résultats expérimentaux de [104] ainsi qu'aux prédictions d'un article de Hong Yong Sohn et Silvia E. intitulé "*Computational Fluid Dynamics Modeling of Hydrogen-Oxygen Flame*"[102].

La figure (a) pour $x/L = 1/8$ montre que les modèles RNG- $k-\epsilon$ et SST- $k-\omega$ représentent une bonne concordance avec les données expérimentales. Cependant, il existe des différences significatives dans les valeurs maximales et les largeurs des distributions, ainsi qu'un décalage entre les sommets des graphiques des deux modèles de simulation numérique et le sommet du graphique des résultats expérimentaux.

Pour $x/L = 3/8$ en (b). L'écart entre les données expérimentales et les prédictions numériques devient plus important, en particulier pour le modèle RNG- $k-\epsilon$, qui présente une différence par rapport au graph des résultats expérimentaux. En revanche, le modèle SST- $k-\omega$ semble correspondre davantage à la forme des données expérimentales malgré la présence d'un décalage minime entre les deux graphs. Bien que le modèle SST- $k-\omega$ présente une sous-estimation de la fraction massique maximale au-delà de $r/R_f=12.5$.

Pour $x/L = 5/8$, l'analyse des profils de la fraction massique d'hydroxyle Y_{OH} révèle des divergences marquées entre les deux modèles numériques et les données expérimentales, comme le montre la figure (c). Le modèle RNG- $k-\epsilon$ sous-estime la fraction massique d'hydroxyle OH, tandis que le modèle SST- $k-\omega$ montre une surestimation.

Pour les graphs de $x/L = 1$ illustrés dans la figure (d), les modèles numériques prédisent des valeurs de fraction de masse Y_{OH} beaucoup plus faibles que les valeurs expérimentales le long de la direction radiale. Une fois de plus, le modèle RNG- $k-\epsilon$ prédit une fraction de masse plus importante que le modèle SST- $k-\omega$.

Par conséquent, les deux modèles numériques utilisés dans cette étude sont parvenus à capturer le comportement qualitatif de la fraction de masse pour le OH mais ils présentent une incertitude très significative en termes d'exactitude et de précision. Par ailleurs, le modèle RNG- $k-\epsilon$ a une tendance de surestimer les quantités Y_{OH} en comparant aux résultats expérimentaux. En revanche, les prédictions du modèle SST- $k-\omega$ sont plus proches de la tendance des données expérimentales, mais il reste toujours incapable de capturer les valeurs maximales des grandeurs.

Les écarts observés entre les résultats des simulations numériques et les données expérimentales mettent en évidence des défis significatifs dans la modélisation des processus de combustion de l'hydrogène. Ces différences révèlent les difficultés intrinsèques des modèles actuels à capturer la complexité chimique des réactions hydrogène-oxygène et les interactions turbulentes hautement dynamiques qui caractérisent cette flamme. Les limitations apparentes exigent la nécessité de développer des approches de modélisation plus sophistiquées, pour traiter ce type d'écoulements.

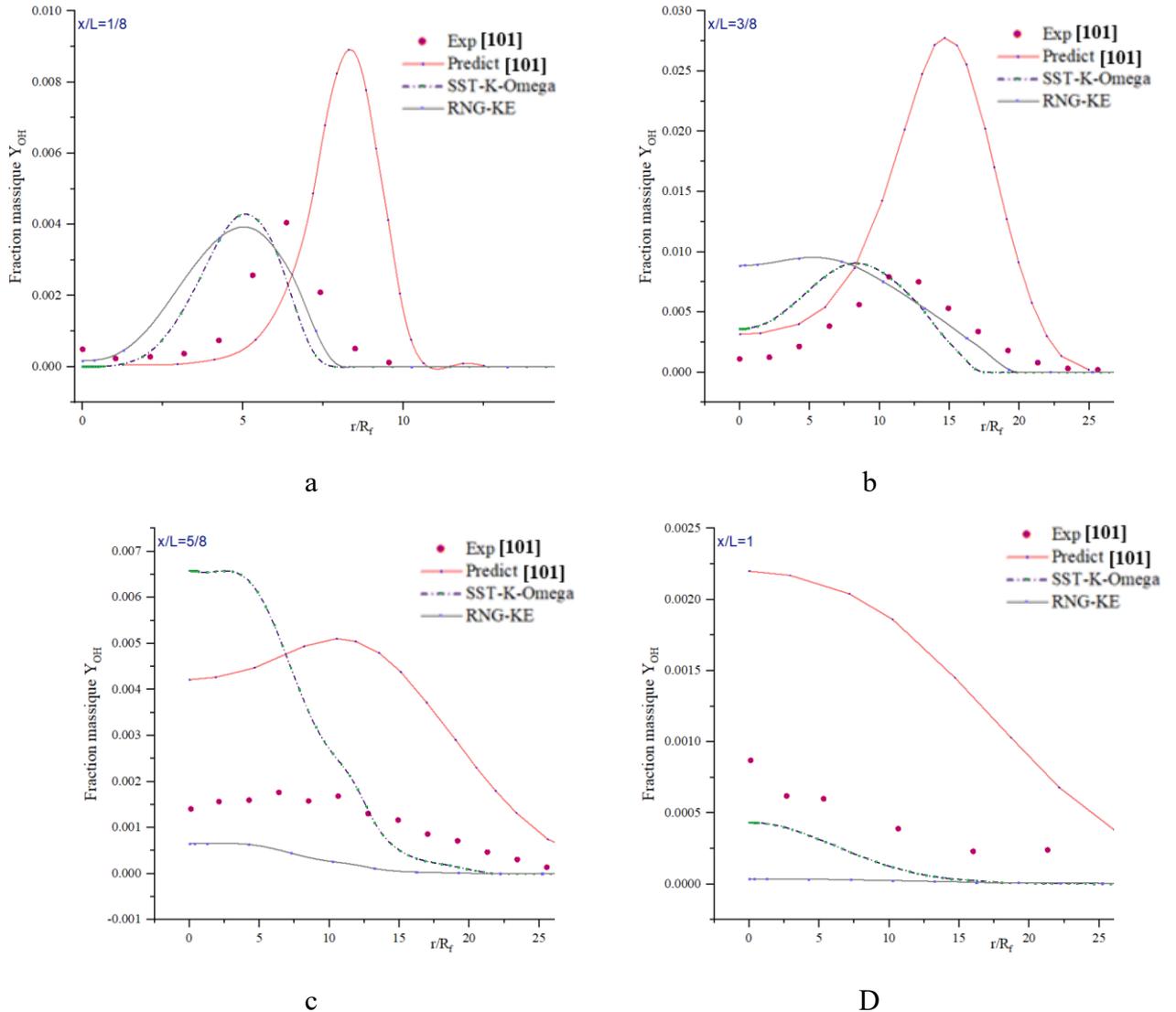


Figure 5-12 : Représentation de la variation de la fraction massique de Y_{OH} dans la direction radiale

5.5.1.2 Etude de l'effet de vitesse d'injection du fuel pour le cas H_2/O_2

L'objectif de cette section c'est d'étudier l'influence de différents taux d'injection d'hydrogène sur le comportement de la température maximale de qui pouvant être atteinte au cours d'un processus de combustion, en accordant une attention particulière aux circonstances de l'apport d'oxygène et d'hydrogène. La température d'injection de l'air est maintenue à 285K et une vitesse constante de 1m/s. L'hydrogène est également injecté à une température plus élevée de 287K, mais à des différentes vitesses comme indiquées dans le tableau (5-4) dessus ;

Vitesse d'injection	Nombre De Reynolds
296	36400
236	28900
200	24500
100	12200
90	11000
50	6110

Table. 5-4 : Nombre de Reynolds en fonction de vitesses d'injection de H₂

Afin de déterminer le régime d'écoulement associé à chaque vitesse d'injection d'hydrogène, nous avons calculé le nombre de Reynolds (Re) correspondant. En utilisant les paramètres d'hydrogène précédemment mentionnés, les valeurs de Reynolds ont été déterminées pour chaque vitesse d'injection. Les résultats sont présentés dans le tableau ci-dessous (Tableau 5-6), qui répertorie les vitesses d'injection et leurs valeurs respectives de Re.

U[m/s]	x/L	$T(\frac{dT}{dx}=0)$	T(x/L=1)
50	0.214	2813	1018
90	0.245	2821	1100
100	0.247	2824	1122
200	0.248	2853	1308
296	0.253	2856	1559

Table. 5-5 : Valeur de vitesses d'injection de H₂ dans des emplacements spécifique dans la chambre de combustion

Pour vérifier la précision de la technique proposée. Les conditions numériques ont été basées sur les données expérimentales de Barlow [98][104] et [105].

Les graphs de figure (5-13) proposent une comparaison des profils de température dans une flamme à diffusion type H₂/O₂, en confrontant les prédictions de calcul des deux modèles de turbulence. Il s'agit de ; RNG-k-ε et le SST-k- ω avec les données expérimentales (à une vitesse d'hydrogène de 296m/s) [98][104].

Les prédictions du modèle RNG-k-ε sont représentées par les lignes étiquetées RNG50 à RNG296, tandis que les lignes avec le préfixe 'SST' indiquent les résultats du modèle SST-k-ω. Les données expérimentales, désignées par 'Exp', servent de référence pour évaluer la précision des modèles de calcul.

L'examen du graphique montre que les températures maximales dans la flamme se produisent à une certaine distance du point d'injection. Il a été constaté que les vitesses d'injection d'hydrogène plus élevées, en particulier dans le modèle RNG, sont en corrélation avec des températures de pointe la plus élevées, ce qui met en évidence la sensibilité du modèle à la vitesse dans la prédiction de l'amélioration du mélange et des taux de réaction.

En contrepartie, les profils du modèle SST-k- ω suggèrent une relation plus complexe, avec des augmentations de température moins prononcées à des vitesses plus élevées. Cela pourrait indiquer une interaction nuancée entre la vitesse, la turbulence et la combustion que le modèle SST-k- ω traite différemment du modèle RNG-k- ϵ .

L'étendue des profils de température des deux modèles donne des indications sur les caractéristiques physiques de la flamme. Les profils plus larges du modèle SST révèlent une structure de flamme plus complète, tandis que les pics plus nets du modèle RNG indiquent une zone de réaction plus ciblée. Ces différences soulignent l'importance du choix du modèle pour prédire les comportements de combustion.

L'analyse des profils de température montrent que la température est maintenue à 300K dans la plage de $0,02 \leq x/L \leq 0,04$. Ceci traduit par l'absence de tout signe de combustion dans cet intervalle, ce qui s'avère critique pour l'allumage du mélange indépendamment de toute vitesse d'injection d'hydrogène utilisées dans cette simulation.

En l'occurrence, dans l'intervalle $0,04 \leq x/L \leq 0,255$, on observe une hausse de température très rapide dont elles sont passées de 300K à 2813K pour une vitesse d'injection d'hydrogène de 50m/s et 2856K pour la vitesse d'injection 296m/s, en outre, on observe un petit décalage entre les graphs qui ne dépasse pas $\Delta(x/L) = 0,031$.

Une autre remarque qui s'agit des piques de graphs $(\frac{dT}{dx})$ qui représente les valeurs maximales de températures qui sont observées à des emplacements spécifiques dont elles se trouvent tous dans une intervalle très étroite $[0,3 ; 0,45]$, il s'agit de 2813K pour la vitesse d'injection 50m/s à $x/L=0,214$ et 2856K pour une vitesse d'injection de 296m/s à $x/L=0,45$, par conséquent, la différence entre températures maximales des deux vitesses est de 45K. malgré que 296m/s est six plus grande que la vitesse 50m/s, ces température commencent ensuite à se diminuées.

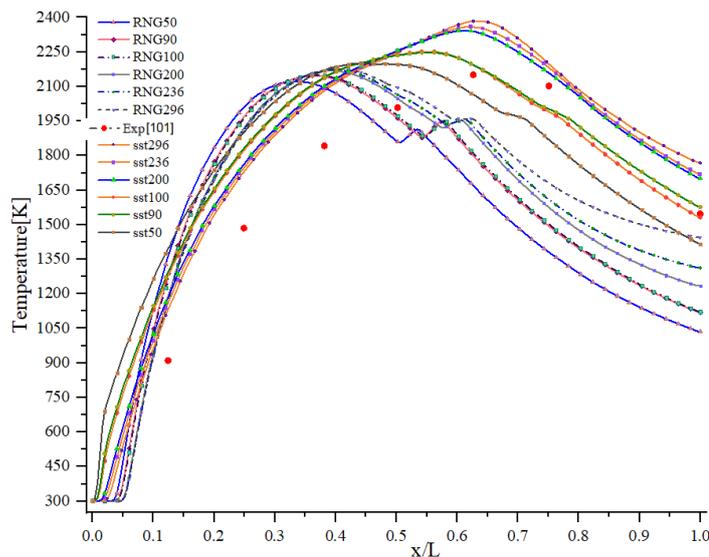


Figure 5-13 : Variation de la température en fonction vitesse d'injection de H_2 selon l'axe central.

La figure (5-14) illustre la distribution radiale de température dans la chambre de combustion, montrant un gradient thermique marqué avec des températures maximales sur l'axe central à $r/R_f = 0$ et décroissantes vers la paroi. Cette répartition indique une concentration

d'énergie au centre de la chambre. L'analyse des profils thermiques pour différentes vitesses d'écoulement (50, 90, 200 et 296 m/s) montre une augmentation générale des températures avec l'accroissement de la vitesse, la tendance générale montrant un accroissement de la température au fur et à mesure que ces valeurs augmentent.

L'analyse de la figure (5-14) met en évidence l'effet de la distribution radiale de température sur la dynamique de la flamme. Les principaux points observés sont les suivants :

1. Les températures maximales sont enregistrées à la position axiale $x/L = 1/4$, indiquant la zone la plus chaude de la flamme.

2. Pour une vitesse d'injection de 50m/s :

- La température chute de 2766K au centre ($r/R_f=0$) à 337K près de la paroi à $r/R_f=14,4$.

3. Pour une vitesse d'injection de 296 m/s :

- La température décroît de 2848 K au centre ($r/R_f=0$) à 300K à $r/R_f=20$.

En conséquence, on observe un gradient thermique radial marqué, avec des températures centrales plus importante à des vitesses d'injection d'hydrogène élevées. Cela met en évidence une corrélation significative entre cette dernière et la distribution de température, avec une décroissance progressive de la température en allant vers les parois de la chambre de combustion.

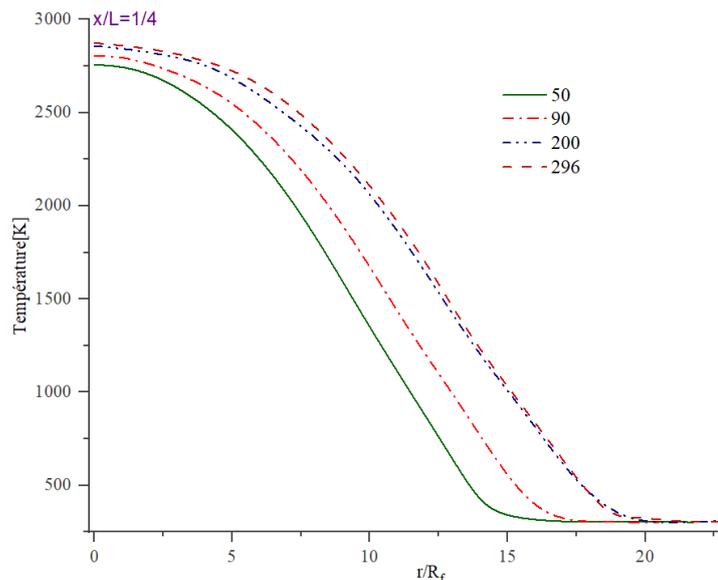


Figure 5-14 :: Variation de la température en fonction vitesse d'injection de H_2 selon la direction radiale.

La figure (5-15) ci-après représente la disposition de température pour différentes vitesses d'injection d'hydrogène

A une vitesse d'injection de 90m/s, la distribution de température est la plus large et relativement homogène aux autres dont, elle présente un taux de réaction chimique plus lent entre les deux réactifs, ce qui conduit à une structure de flamme plus complète et plus diffuse. Ceci est confirmé par une marge plus large de températures intermédiaires représentées par les régions verte et jaune.

La croissance de la vitesse d'injection à 236m/s, puis à 290m/s, modifie radicalement les caractéristiques thermiques de la flamme, comme le montrent les régions à haute température plus nettes et plus concentrées. Pour des vitesses plus élevées introduisent plus de turbulence, qui à son tour augmente le taux du mélange H_2/O_2 et raccourcissent la zone de réaction, ce qui conduit à des gradients de température plus importants et à un dégagement de chaleur plus localisé. La transition nette entre les zones de température élevée (rouge) et basse (bleu) indique un front de flamme plus intense et plus compact.

Ce régime est marqué par un nombre de Damköhler plus élevé, signifiant la prédominance des réactions chimiques sur les processus de mélange. Avec l'augmentation de la vitesse, on observe également un déplacement notable des zones de température maximale vers l'aval, ce qui montre une cinétique de combustion plus rapide et une conversion plus efficace du potentiel chimique du combustible en énergie thermique.

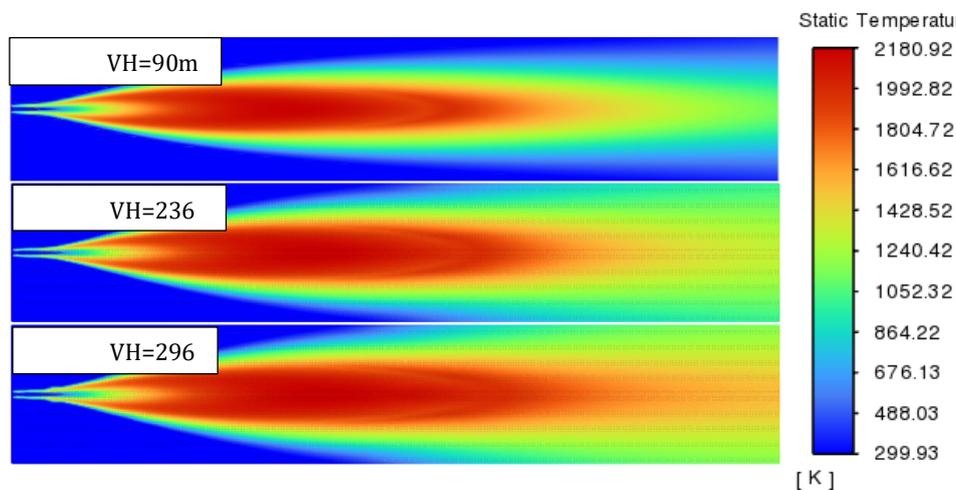


Figure 5-15 : Champs de températures influencés par vitesses d'injection d'hydrogène[99]

5.5.1.2.1 Influence de la vitesse d'injection sur la dilution de l'hydrogène

Les graphiques de la figure (5-16) illustrent la relation entre la fraction massique d'hydrogène Y_{H_2} et la vitesse d'injection de l'hydrogène, représentée par les vitesses de 50m/s à 296m/s.

L'analyse des graphs montre que la fraction massique d'hydrogène Y_{H_2} diminue fortement en s'éloignant du point d'injection, ce qui est un comportement typique du processus de diffusion. La fraction massique initiale au point d'injection $x/L=0$ est proche de 1.

En outre, l'analyse des courbes présentées en (5-16) montrent une célérité de consommation d'hydrogène exceptionnellement rapide pour toutes les vitesses d'injection du fuel. Il est remarquable que, au-delà de la position $x/L=1/4$, l'hydrogène disparaît complètement, indiquant une combustion complète dans cette région de la chambre de combustion.

Une observation notable concernant la distance entre l'extrémité postérieure de la flamme et l'injecteur principal, qui marque le point de départ de la consommation d'hydrogène et le début de la création de la flamme. Cette observation est valable pour toutes les valeurs de x/L comprises entre (0,028 ; 0,25) ou (0,048 ; 0,25) respectivement quel que soit la vitesse d'injection considérée. Plus précisément, une vitesse d'injection de 50m/s correspond à une valeur de $x/L=0,028$, alors qu'une vitesse d'injection de 296m/s correspond à une valeur de

0,048. Ces valeurs représentent les limites extrêmes de la gamme des vitesses d'injection possibles.

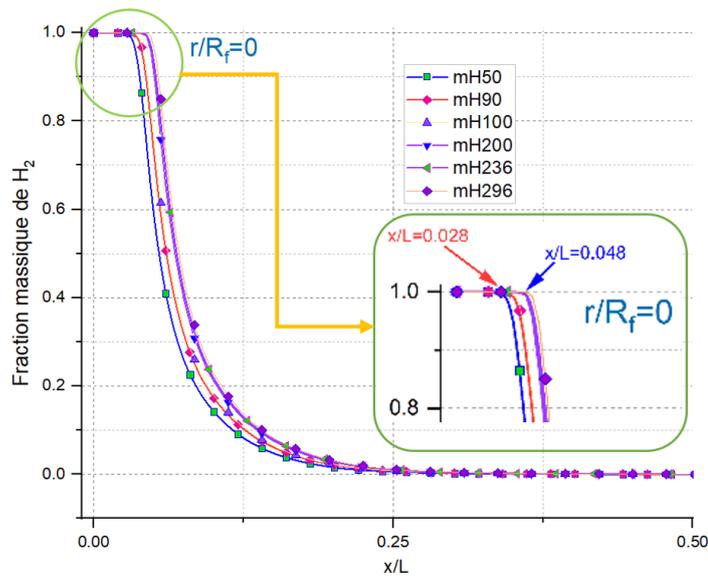


Figure 5-16 : variation de la consommation de H₂ sur l'axe central.

5.5.1.2.2 Impact de la Vitesse d'Injection de l'Hydrogène sur la Déplétion du O₂ :

L'étude de la relation entre la vitesse d'injection de l'hydrogène et d'autres paramètres de combustion, notamment la température et les fractions de masse, prouve une corrélation proportionnelle, c'est la raison pour laquelle on estime qu'il est utile d'étudier le reste des paramètres en se limitant pour les deux vitesses extrêmes $V_H=50\text{m/s}$ et 296m/s .

Les deux graphes de la figure (5-17) illustrent l'effet de la vitesse d'injection d'hydrogène sur la variation de la fraction massique d'oxygène Y_{O_2} dont. Les graphes sont dressés dans les directions axiale et radiale de la chambre de combustion.

Le graphique de la figure (5-17a) décrit la relation entre la fraction massique d'oxygène Y_{O_2} dans la direction radiale. Les deux courbes de la figure (a) correspondent à deux vitesses d'injection d'hydrogène distinctes : 50m/s et 296m/s . Par ailleurs, les deux courbes commencent de zéro à l'entrée de la chambre de combustion (à $x/L \approx 0$), dont, les deux graphes présentent des segments de longueurs différentes qui sont inversement proportionnels aux valeurs de vitesses d'injection d'hydrogène, de même, le graphique correspondant à la vitesse la plus grande se trouve sous celui de la petite vitesse. On outre, on note que la fraction massique d'oxygène atteignait 0,38 pour $V_H=296\text{m/s}$ et 0,55 pour $V_H=50\text{m/s}$. De manière intrigante, lorsqu'on est sur le point $r/R_f=20$, les deux graphiques représentant les variations des fractions massiques d'oxygène qui présentent une convergence vers une valeur de 1. Cette observation est interprétée comme une indication de l'absence de combustion dans la direction radiale allant de ce point.

Le graphique de la figure (5-17b) illustre les variations des fractions massiques de l'hydrogène et de l'oxygène dans la direction radiale de la chambre de combustion pour $x/L=1/4$. Dont, qu'il a été constaté que la distribution de l'hydrogène dans cette direction atteint ses valeurs maximales, soit $1,17 \times 10^{-2}$ pour $V_H=296\text{m/s}$ et $6,7 \times 10^{-3}$ pour $V_H=50\text{m/s}$ le long de l'axe central de la chambre de combustion. Notamment, ces valeurs tombent à zéro à $r/R_f=15$, ce qui

indique que dans cette position il n'y a plus d'hydrogène. De plus, une observation intrigante révèle une relation inverse entre la fraction massique d'oxygène à la sortie de la chambre de combustion $x/L=1$ et les valeurs d'injection d'hydrogène. Pour illustrer ce phénomène, prenons l'exemple d'une vitesse d'injection de $VH=50\text{m/s}$, pour laquelle la fraction massique d'oxygène est de 0,94. En revanche, lorsque la vitesse d'injection atteint $VH=296\text{ m/s}$, cette fraction diminue à 0,87. Ce résultat indique que pour les vitesses d'injection d'hydrogène plus élevées conduisent à une réduction de la fraction massique d'oxygène à la sortie de la chambre de combustion.

Par conséquent, dans des conditions géométriques identiques, la déplétion d'oxygène est plus importante pour une vitesse d'injection de 296m/s que pour une vitesse de 50m/s. Cela indique que l'énergie dégagée à 296m/s est plus élevée qu'à 50m/s, comme le confirment les données du tableau (5-5) et les graphiques des figures (5-13) et (5-14). De plus, la comparaison des nombres de Reynolds pour chaque vitesse, indiquée dans le tableau (5-4), montre que le nombre de Reynolds correspondant à une vitesse de 50m/s est beaucoup plus faible que celui à 296m/s ($6110 \ll 36400$), ce qui montre que la turbulence joue un rôle très important dans le comportement de la combustion et ses paramètres.

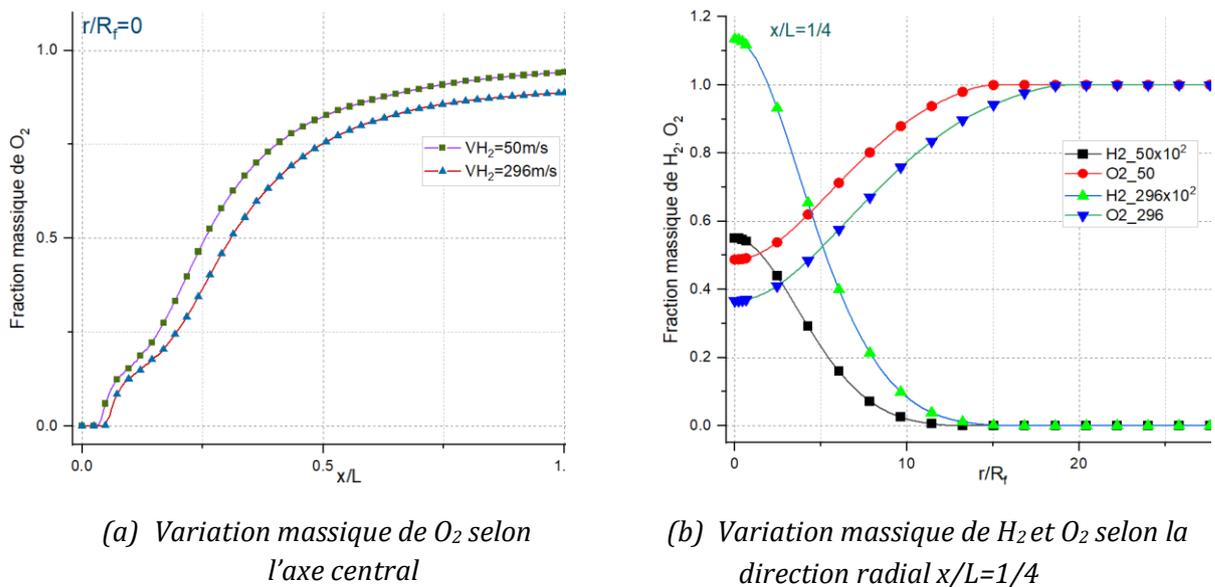


Figure 5-17 : variation des fractions massiques des réactants pour le cas de combustion H_2/O_2 .

5.5.1.2.3 Prédiction des radicaux libres H, O et OH :

Dans le domaine de la chimie de la combustion, les radicaux libres tel que l'hydrogène (H), l'oxygène (O) et l'hydroxyle (OH) jouent un rôle indispensable dans la propagation et la régulation des réactions de combustion. La molécule d'oxygène, en tant que di-radical (O-O), possède deux électrons non appariés, ce qui la rend relativement inerte à des températures ambiantes, mais très réactive dans des conditions thermiques élevées. Pour que la combustion s'amorce, cette propriété implique de franchir une barrière énergétique importante, généralement sous l'effet de la chaleur. Cela permet de passer d'un état de spin non apparié à un état de spin apparié. Une fois cette transition effectuée, les radicaux d'oxygène deviennent partie intégrante du déclenchement de diverses réactions radicalaires en chaîne. Ces radicaux réagissent ensuite pour produire des hydroperoxydes (H_2O_2), qui se décomposent en des

radicaux d'hydroxyles (HO \cdot). La concentration de ces radicaux influence directement l'inflammabilité du fuel considéré. Cette interaction des espèces radicalaires souligne la complexité des processus de combustion et met en évidence le rôle nuancé que jouent ces radicaux en influençant la dynamique de la combustion.

Les graphes illustrés dans la figure (5-18) ont présenté une étude comparative de l'effet de la vitesse d'injection de l'hydrogène sur le comportement des radicaux réactives dans une flamme. Cette comparaison est effectuée pour deux vitesses d'injection d'hydrogène. Il s'agit de ; 50m/s et 296m/s. Les fractions massiques des radicaux hydroxyle (OH), hydrogène (H) et oxygène (O) ont été mesurées sur la longueur normalisée de la chambre de combustion (x/L).

La figure (5-18) présente plusieurs courbes pour chaque espèce pour les deux vitesses, ce qui signifie qu'on examine les profils de la fraction massique de ces radicaux le long de la longueur normalisée de la chambre. Ces profils présentent l'évolution de Y_X (X est le radical considéré ; H, OH ou O) du début à la fin de la zone de réaction, ce qui est essentiel pour comprendre les processus de combustion, la cinétique de réaction et l'efficacité de la réaction.

L'analyse des courbes permettent de tirer les remarques suivantes :

1. Les fractions massiques maximales pour les radicaux OH, H et O sont proportionnelles aux vitesses d'injection d'hydrogène. Dont, les plus élevées sont enregistrées pour 296m/s. Cela inspire que les vitesses plus élevées peuvent contribuer à un mélange ou à des réactions plus rapides, par suite, elles entraînent des grandes concentrations de ces radicaux.
2. Les pics pour la vitesse d'injection de 296m/s se produisent légèrement plus tôt dans la chambre (à une valeur x/L plus faible) par rapport aux pics pour la vitesse de 50m/s. Cela indique que les réactions se produisent plus rapidement avec une vitesse plus élevée, ce qui est cohérent avec l'idée que des vitesses plus élevées améliorent le mélange. Ensuite, les fractions massiques des radicaux ont subi des diminutions en fur et à mesure en se déplaçant dans la direction axiale vers la sortie de chambre de combustion, ce qui devrait être dû à la réaction des radicaux et à la formation de produits.
3. Les comportements distincts de OH, H et O donne leurs rôles spécifiques dans le mécanisme de réaction, avec OH montrant les variations les plus importantes en termes de fraction massique. Cela indique que le OH est une clé intermédiaire dans le processus de combustion.

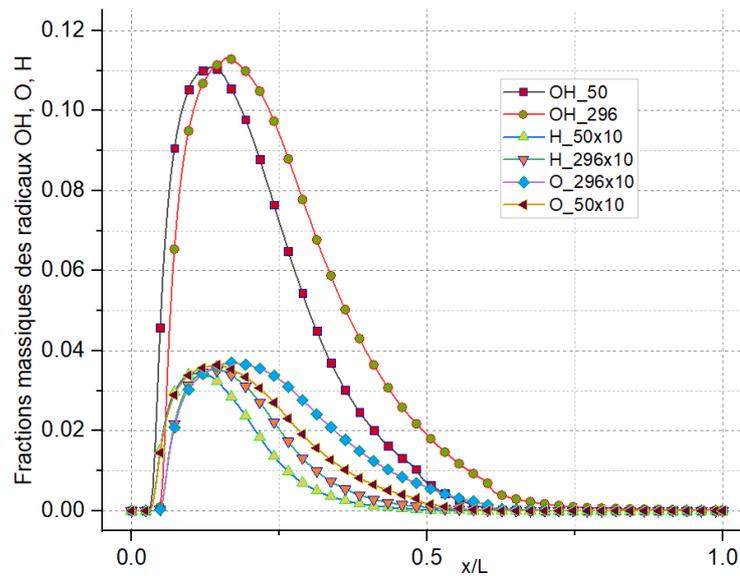


Figure 5-18: variation des fractions massiques du radical OH pour le cas de combustion H_2/O_2 .

Les observations susmentionnées soulignent l'importance de la vitesse d'injection de l'hydrogène au cours de la combustion et son influence sur le comportement des flammes d'hydrogène. L'augmentation de la vitesse d'injection entraîne une augmentation de la production d'énergie, principalement en induisant une diminution de la fraction de masse des réactifs, en particulier à la sortie de la chambre de combustion. Ces résultats ont des implications notables pour l'efficacité globale aux performances opérationnelles du système de combustion hydrogène/oxygène.

5.5.2 Cas de combustion hydrogène-Air (O_2+N_2)

Les flammes turbulentes de diffusion de type H_2 /air ont fait l'objet d'études approfondies et sont très répandues dans la communauté scientifique. Elles présentent des réactions chimiques ultra rapides dans des milieux agités.

Dans cette section de la présente étude on se concentre sur une analyse numérique des flammes turbulentes non-prémélangées de type hydrogène-air dans une configuration à écoulement co-courant. Pour ce cas, la turbulence est définie selon le modèle SST-k- ω , qui a été précédemment validé et largement utilisé dans la littérature scientifique.

Dans la section précédente, on a déjà étudié l'influence de la vitesse d'injection d'hydrogène sur le comportement de la flamme. Par la suite, nous nous concentrons sur une comparaison entre les flammes H_2/O_2 et H_2 /Air dans des conditions spécifiques. Il convient de noter que, pour cette comparaison, nous nous limitons aux conditions aux limites décrites dans les études de H.Y. Sehn [104], K. Fukumoto [100] et M. Senouci [105] ce qui nous permet de faire une évaluation la différence entre ces deux types de flammes.

L'utilisation de simulations numériques dans le domaine d'étude est largement répandue en raison de ses avantages en termes de sécurité et de coût. Cependant, il est essentiel de discuter la fiabilité des modèles numériques adoptés. Dans cette section, nous concentrons sur la comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux afin d'évaluer la méthode proposée. Pour ce faire, une simulation d'une flamme de diffusion de type H_2 /air a été réalisée

en utilisant des paramètres numériques basés sur les données expérimentales de Barlow et al., 2003a [67][98][104] et [106].

5.5.2.1 Influence de la vitesse de soufflage de l'air sur le comportement de la flamme :

Cas 1 : Le fuel en injecteur centrale :

Les représentations visuelles de courbes de niveau illustrées dans la figure (5-20), montrent un aperçu complet du comportement thermique d'un mélange air-hydrogène en réponse à une gamme de vitesses d'injection d'air dans une chambre de combustion. Les courbes de niveau sont précisément conçues pour présenter la distribution de la température dans un champ normalisé. Les axes verticaux et horizontaux sont mis à l'échelle pour montrer les positions radiales (r/R_f) et axiales (x/L) normalisées, respectivement. Cela permet de visualiser les gradients thermiques dans la chambre de combustion.

Comme le montre la figure (5-19), lorsque la vitesse d'injection de l'air est augmentée d'une vitesse de 5m/s à une vitesse maximale de 40m/s, des changements apparents entrent en jeu, à la fois dans la distribution de la température et dans la dynamique structurale de la zone de réaction à l'intérieur du mélange air-hydrogène. Ces changements sont importants car ils influencent directement le processus de combustion.

De plus, les données montrent une légère augmentation des températures maximales ainsi qu'une expansion des zones à haute température. Cela montre que des vitesses d'injection d'air plus élevées favorisent un meilleur mélange, conduisant à une combustion plus efficace.

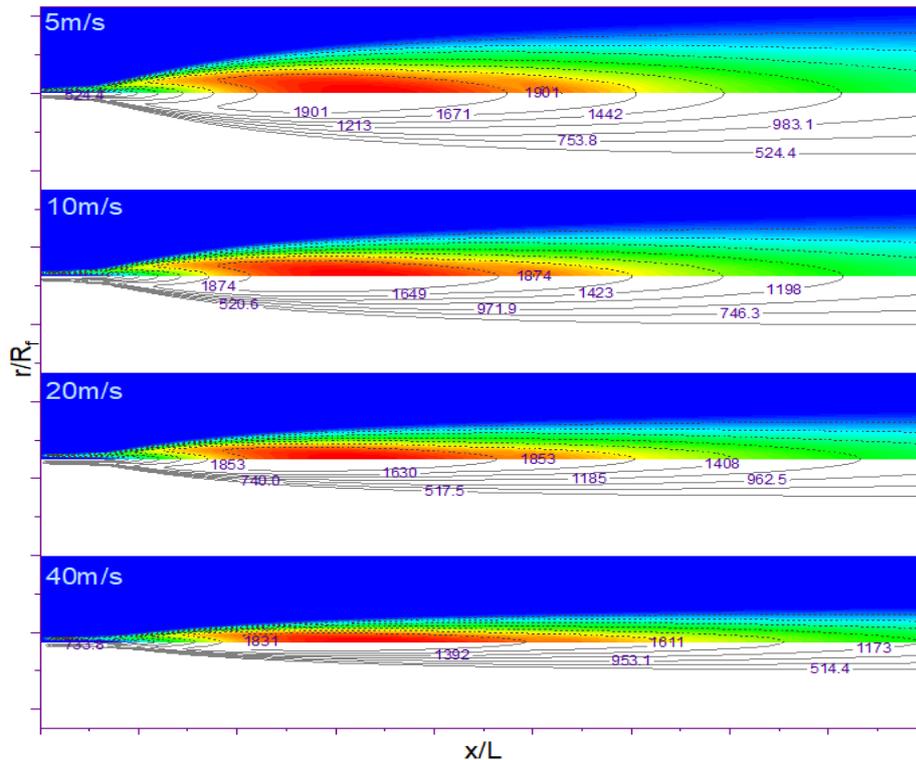


Figure 5-19 : Effet de la vitesse de soufflage de l'air sur la distribution de la température

Les graphiques de la figure (5-20) ; (a), (b) et (c) ci-après, dont la température, la fraction massique Y_{OH} , Y_{NO_x} , Y_{N_2} sont tracées en fonction de x/L pour les vitesses respectives. Quelle que soit la vitesse, chaque courbe présente une allure similaire : une montée rapide jusqu'à un pic de température, suivie d'une lente descente. Les températures maximales pour les différentes

vitesse sont presque identiques, ce qui implique que la libération d'énergie maximale de la réaction est invariante par rapport aux changements de vitesse d'injection d'air dans la plage étudiée. Néanmoins, on observe un léger déplacement de la position du pic de température vers la droite à mesure que la vitesse augmente, ce qui pourrait indiquer que des vitesses plus élevées pourraient accélérer le trajet des réactifs vers la zone de réaction en affectant ainsi la localisation du taux de réaction maximal.

L'analyse de l'interaction entre la vitesse d'injection de l'air et la production d'hydroxyle OH fait apparaître une relation inverse distincte. Cette proportionnalité se caractérise par une diminution des taux de production d'hydroxyle OH à mesure que la vitesse d'injection de l'air augmente. Cette tendance est particulièrement formulée dans le cas où l'air est injecté à une température ambiante, plus précisément à $T_{\text{air}}=300\text{K}$. L'examen des données présentées dans les graphiques 5-21(a) et (b) permet de mieux comprendre la situation. Il devient évident que le flux d'air, dans ces conditions, joue un rôle déterminant qui va au-delà de la simple participation au processus de combustion. Il agit plutôt comme un agent de refroidissement dynamique dans la chambre de combustion. Cet effet de refroidissement n'est pas anodin ; il modifie de manière significative la dynamique thermique à l'intérieur de la chambre. L'air injecté ne se limite donc pas à fournir l'oxygène nécessaire à la combustion, mais aussi, il joue également un rôle actif en modulant la température au sein de la chambre de combustion.

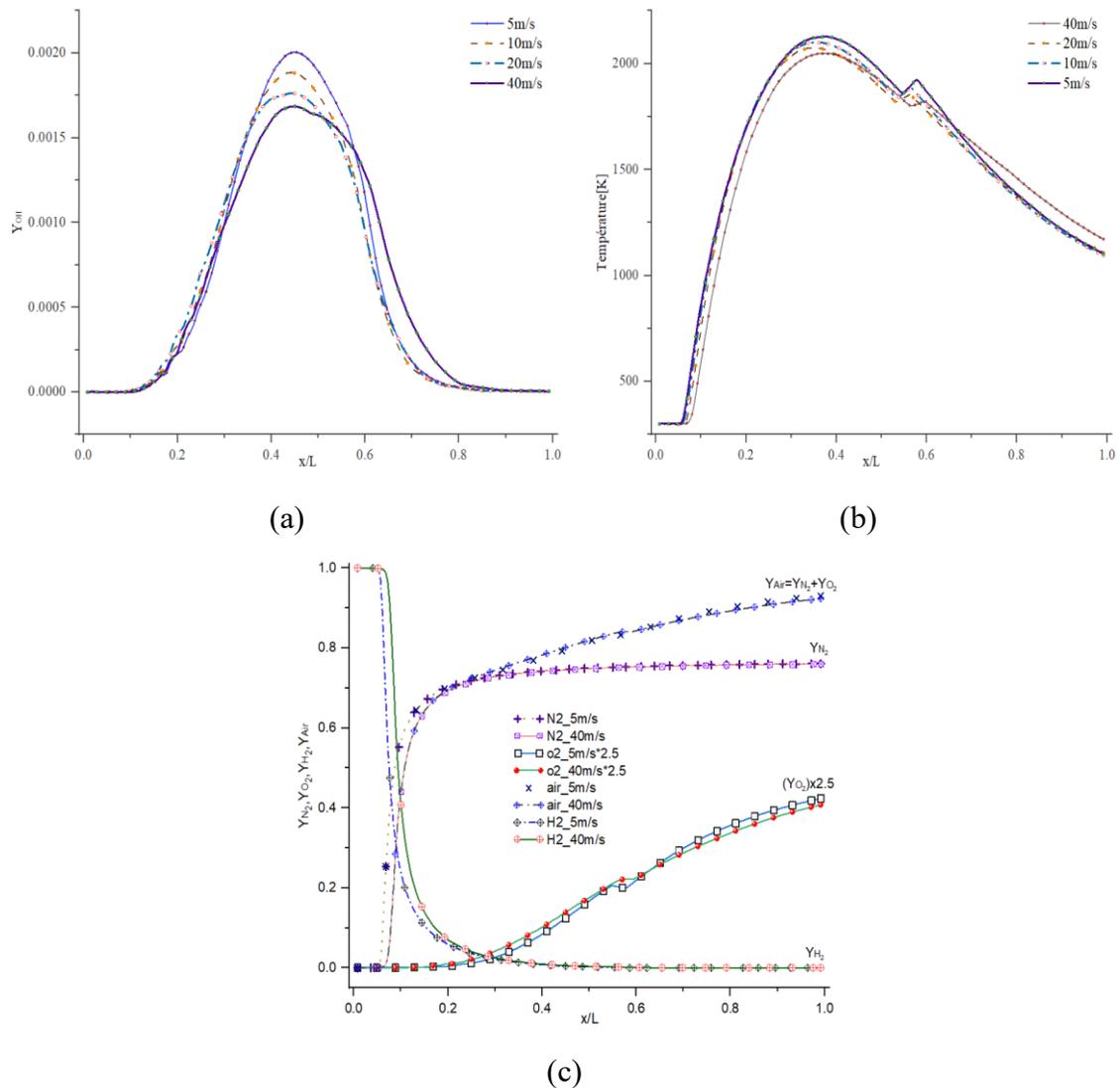


Figure 5-20 : influence de la vitesse de soufflage de l'air sur les paramètres de combustion

5.5.2.2 Influence de la vitesse de soufflage de l'air sur la formation des Nox :

Le mécanisme de Zeldovich, qui postule que la formation de NOx est principalement fonction de la température de combustion, est responsable de cette tendance. Dans la combustion hydrogène-air, les températures élevées de la flamme donnent aux molécules d'oxygène (O₂) et d'azote (N₂) de l'air l'énergie nécessaire pour démarrer une chaîne de réactions qui créent du monoxyde d'azote (NO), qui est la première étape de la formation de NOx. [93] [107]

L'analyse des graphiques des figures (5-21) et (5-22) met en évidence l'impact significatif de la vitesse d'injection de l'air sur la production d'oxydes d'azote (NOx). Cette observation est particulièrement importante si l'on considère le mécanisme de Zeldovich, qui décrit la formation thermique des NOx. Les résultats montrent une diminution marquée de la fraction massique Y_{NOx} en augmentant la vitesse d'injection de l'air, passant de Y_{NOx} = 0,0030 à une vitesse de l'air de 5m/s, à environ Y_{NOx} = 0,00005 pour une vitesse de 40m/s.

Les données montrent que plus que la vitesse d'injection de l'air augmente, les concentrations maximales de NOx se penchent vers la sortie de chambre de combustion. Bien qu'on constate les pics de NOx montrent une proportionnalité inverse aux vitesses d'injection de l'air. Cela signifie que des vitesses plus élevées améliorent le mélange en diminuant ainsi les concentrations des NOx.

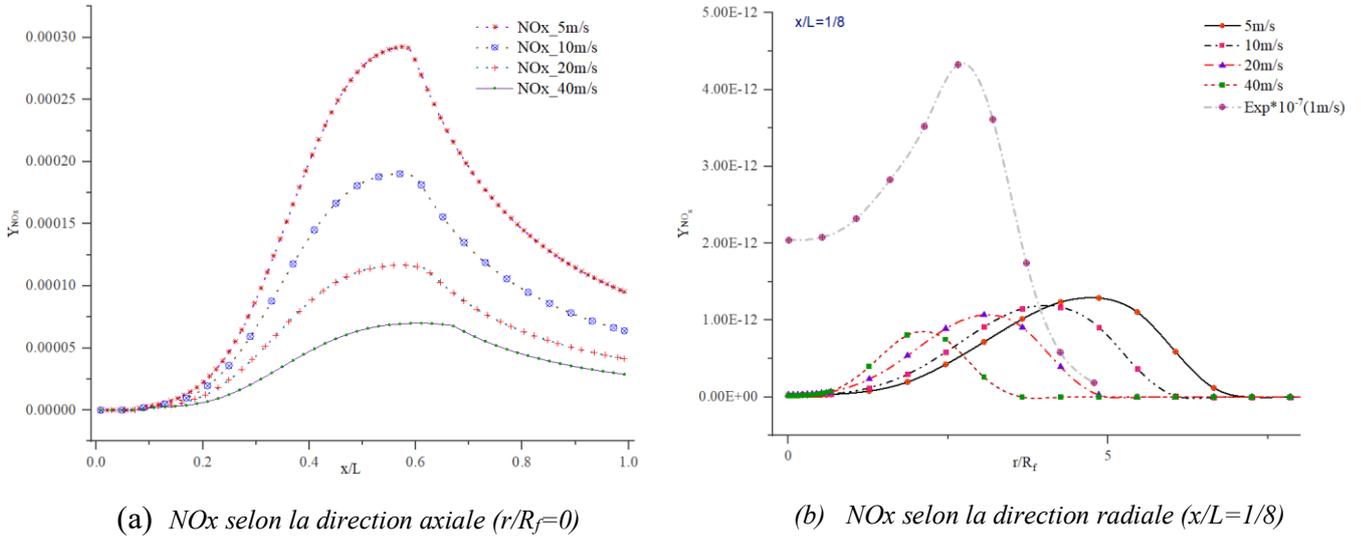


Figure 5-21 : Effet de la vitesse de soufflage de l'air sur la formation des NOx.

La figure (5-22) montre deux courbes de niveau de distribution des NOx à des vitesses d'injection d'air de 5 m/s et 40 m/s. Le tracé supérieur pour 5m/s montre des niveaux de NOx plus élevés, indiqués par des cercles rouges et jaunes. Cela montre qu'une injection d'air plus lente crée des conditions favorables pour la formation des NOx qui sont provoqués par la présence des températures plus élevées. En revanche, Le graphique concernant la vitesse 40m/s, indique des concentrations de NOx réduites. Cela signifie qu'une injection d'air plus rapide entraîne un meilleur mélange due à la turbulence, ce qui entrave la création des NOx.

Par conséquent, les images de la figure (5-20) et les graphes de la figure (5-21) et (5-22) illustrent clairement la relation inverse entre la vitesse d'injection d'air et la concentration de NOx, offrant un aperçu des stratégies potentielles de contrôle des émissions de NOx dans les systèmes de combustion.

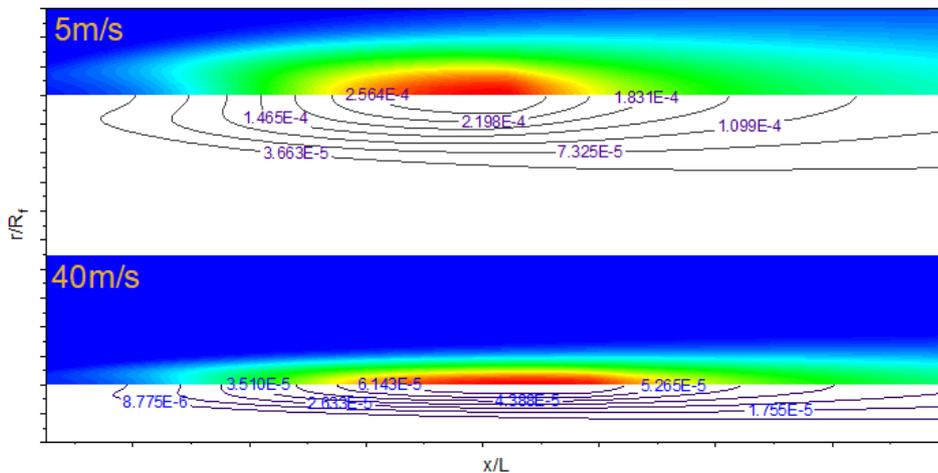


Figure 5-22 : Répartition des NOx dans la chambre de combustion.

Cas 2 : L'air en injecteur centrale :

Selon [107], [108] et [109] dont ils postulent que les oxydes d'azote (NO_x) sont des polluants environnementaux néfastes. Ils sont principalement produits lors des processus de combustion à haute température dans les moteurs et les installations industrielles selon le mécanisme de Zeldovich, en particulier à des températures de l'ordre de 1800K qui provoque le nitrogène N₂ de se réagir avec les atomes d'oxygène O₂ de l'air pour former du NO et du N₂O.

Des techniques telles que la recirculation des gaz d'échappement (EGR) est employée pour réduire les émissions des NO_x, en particulier dans les moteurs à combustion interne. Dont le principe de la méthode de recirculation des gaz d'échappement (EGR) consiste à faire réinjecter une partie des gaz d'échappement du moteur dans les cylindres ce qui provoque la dilution de la teneur en oxygène dans le mélange air-combustible, ce qui permet d'abaisser les températures de combustion et de réduire la formation de NO_x.

Par ailleurs, des stratégies sont mises en œuvre pour réduire les concentrations d'oxygène dans la chambre de combustion. Dans cette perspective, nous cherchons un moyen d'épuiser complètement l'oxygène injecté dans la chambre ou de déterminer la bonne proportion entre air et combustible.

L'équation de combustion hydrogène dans l'air est définie comme suit :



Nous avons 21% d'oxygène dans l'air, dont le rapport stœchiométrique air-combustible est égal à 2.38 c'est le volume d'air nécessaire pour brûler complètement un volume d'hydrogène.

Dans le présent cas on a choisi une approche numérique qui consiste à injecter de l'oxygène dans la chambre de combustion par le biais d'un injecteur central tout en contrôlant le débit d'air en ajustant sa vitesse et en introduisant du carburant à travers l'injecteur périphérique. Dont, en gardant les mêmes données opératoires qui concerne l'hydrogène et en faisant varier la vitesse d'injection de l'air.

Les résultats numériques confirment que l'injection d'air dans une chambre de combustion via un injecteur central joue un rôle essentiel dans l'efficacité du processus de combustion. L'air injecté par l'injecteur central favorise un mélange air-combustible plus homogène, essentiel pour une combustion complète et optimale. De plus, la vitesse d'injection d'air, comme indiqué à la figure (5-23), influence fortement le profil de température dans la chambre. Des vitesses d'injection élevées améliorent l'homogénéité du mélange, conduisant à une répartition plus uniforme de la température, ce qui est avantageux pour réduire l'apparition de points chauds (hot spots), souvent associés à la formation de polluants tels que les oxydes d'azote (NO_x).

Les simulations numériques montrent que l'injection d'air à une vitesse de 5 m/s produit une flamme stable et laminaire caractérisée par un front de flamme distinct et cohérent. L'augmentation de la vitesse à 10m/s entraîne un allongement de la flamme et de légères perturbations en laissant entrevoir les premiers stades de l'instabilité.

L'injection de l'air à un débit de 20m/s perturbe davantage la flamme en provoquant une expansion de la zone de réaction et un brouillage du front de flamme, ce qui indique une évolution vers une combustion turbulente. La poursuite de l'augmentation de la vitesse

augmente la surface de contact entre les réactifs. À la vitesse la plus élevée de 40m/s, le front de flamme devient extrêmement turbulent, avec un étirement accru et une zone de réaction très dispersée, poussant la flamme vers une extinction potentielle en raison de l'intensité du courant d'air. Par ailleurs, on a constaté que la température maximale est proportionnelle à la vitesse de soufflage de l'air. Dans ce contexte, une température maximale de 1405K est enregistrée pour $V_{\text{air}}=5\text{m/s}$. La température augmente jusqu'à 1940K pour $V_{\text{air}}=40\text{m/s}$. En outre, la température maximale se retire de l'avant vers l'arrière (Figure 5-24), ainsi que le front de flamme s'échappe vers l'avant, donnant lieu à une interface de contact H_2/air proportionnelle à la vitesse d'injection de l'air. Ce qui devrait exercer un impact notable sur la dynamique de la flamme en améliorant finalement l'efficacité du processus de combustion.

En contrepartie, le volume d'air délivré par l'injecteur central influence la stabilité et la régularité de la flamme. Plus précisément, si la vitesse de l'air injecté du centre est trop élevée en dépassant la valeur (2,38) du rapport stœchiométrique air-combustible dont elle peut perturber la flamme, ce qui risque de l'éteindre.

En revanche, lorsque l'air est injecté à des vitesses optimales, il peut favoriser un front de flamme stable en garantissant l'efficacité du processus de combustion.

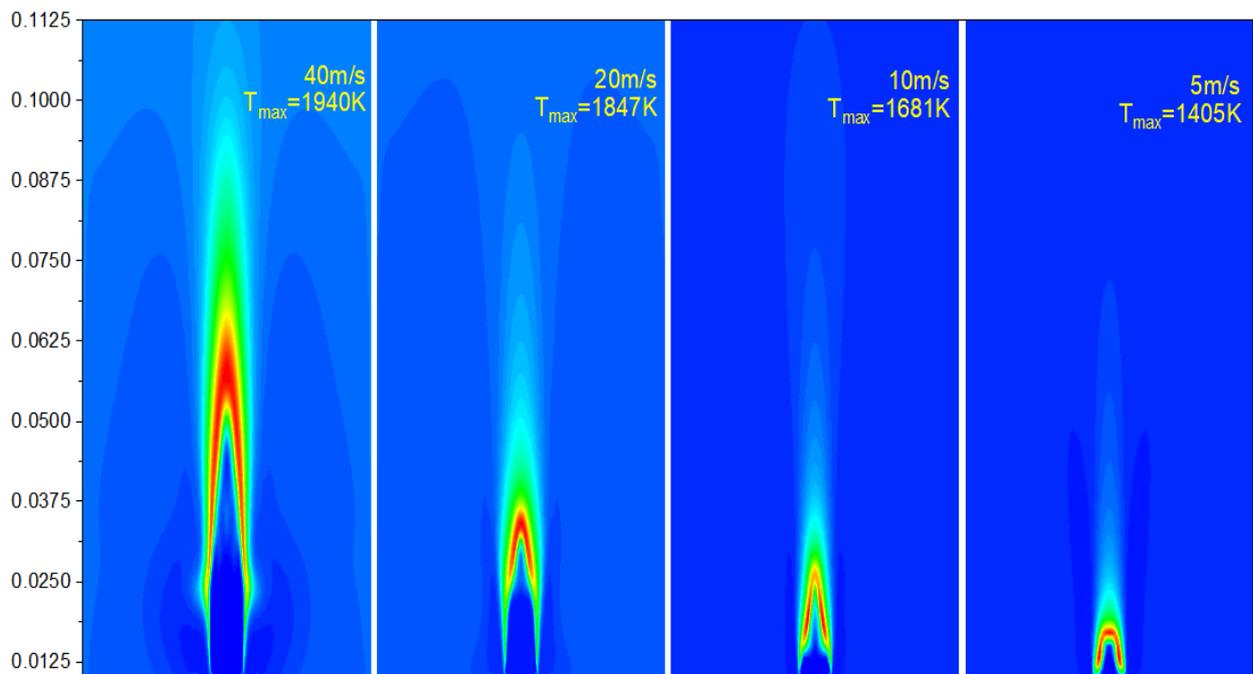


Figure 5-23 : Profils de température affecté par l'injection de l'air par le centre.

La Figure 5-24 (a), (b), (c) (d) et (e) ci-après présente des graphs concernant les variations des différents paramètres de la combustion pour étudier l'effet d'injection de l'air dans la chambre de combustion à travers l'injection centrale. L'objectif d'initier ce cas c'est pour minimiser la formation thermique des NO_x selon le mécanisme de Zeldovich [107][110] qui est défini par l'oxydation d'azote dans un milieu à haute température d'environ 1500°C . la température selon la Direction axiale de la chambre de combustion, dont on a constaté que les graphes présentent des pics très aigus dans un espace très serré, ce qui est interprété que la flamme ne pourra plus combler toute l'espace de la chambre de combustion due au épuisement d'oxygène ce qui provoque une combustion à défaut d'air.

L'examen du graphique (e) révèle que l'injection d'air par l'injecteur central perturbe significativement la formation des NOx, mais avec une réduction notable par rapport au cas initial. De plus, le graphique (b) indique une combustion incomplète de l'hydrogène est une conséquence à la vitesse d'injection élevée (296 m/s). Selon les données expérimentales issues de [98][104]. Par conséquence, les résultats numériques obtenus confirment que l'injection de l'air à travers l'injecteur central à un impact environnemental très intéressant, bien que le supplément d'hydrogène puisse être dépassé par le redimensionnement de la chambre de combustion ou de réduire le débit d'hydrogène.

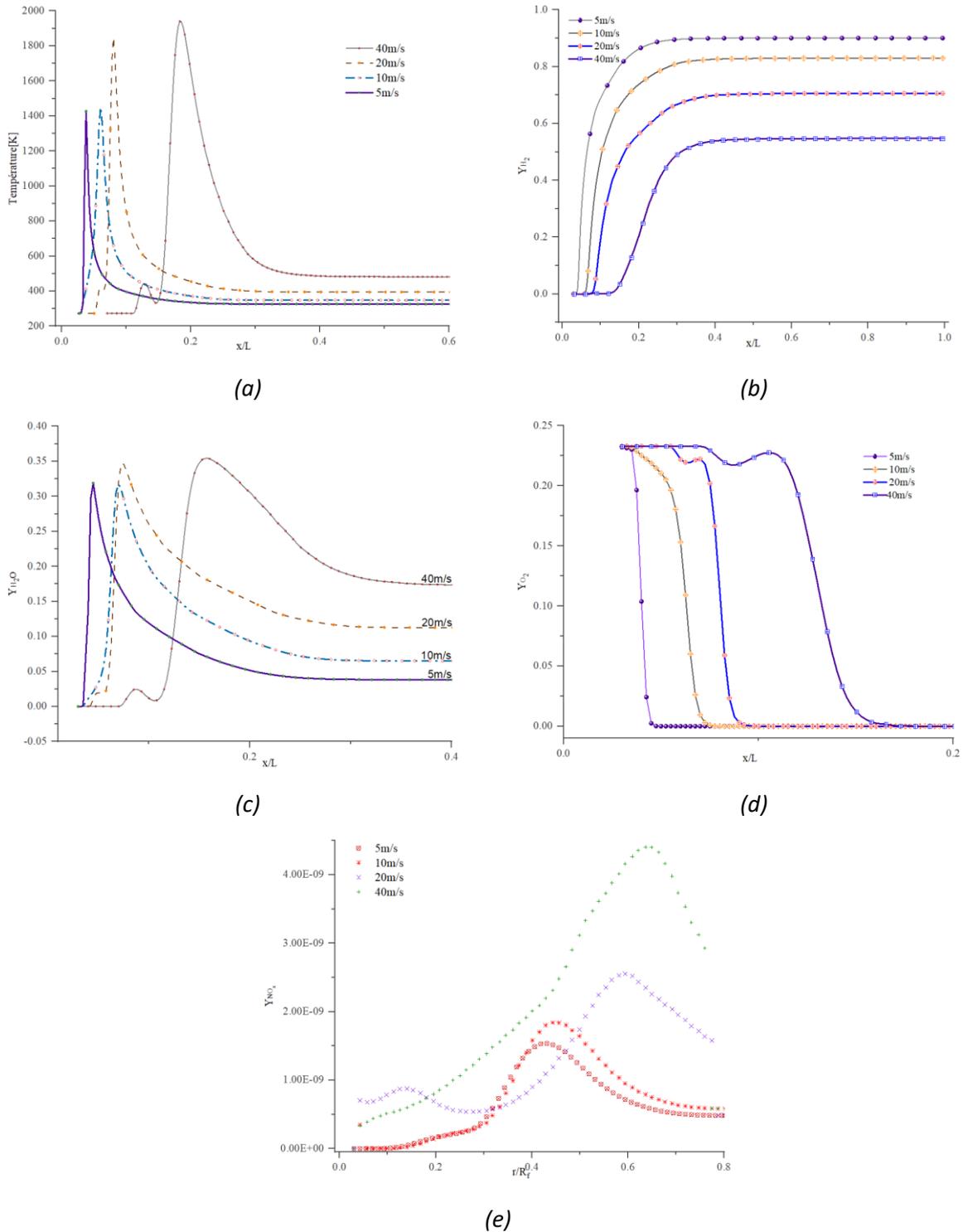


Figure 5-24 : Profils de température affecté par l'injection de l'air par le centre.

5.5.2.3 Validation des paramètres d'une flamme de diffusion H₂/O₂ et H₂/air

5.5.2.3.1 Profils de température :

La figure (5-25) illustre les profils de température pour une flamme de diffusion de type H₂/O₂ et H₂/air. Il est important de signaler que les résultats expérimentaux se rapportent spécifiquement à une flamme de diffusion turbulente de type H₂/air, qui sont obtenus à partir des études réalisées par H.Y Sohn [104] et K. Fukumoto [100].

De plus, la figure (5-25) met en évidence plusieurs observations concernant les températures des flammes de diffusion H₂/O₂ et H₂/air. Dans une première vision, initialement, dans l'intervalle $0 \leq x/L \leq 0.40$ on a constaté qu'il y a une bonne correspondance entre les températures de la flamme H₂/air avec les résultats expérimentaux de [101] et [100], mais, au-delà de $x/L = 0.40$ une divergence est enregistrée entre les graphes de température de la simulation numérique qu'ils présentent une surestimation de la température en comparant avec l'expérimentale. Dont, La température maximale de la flamme H₂/O₂ est mesurée à 2851K pour $x/L = 0.25$, tandis que la flamme H₂/air atteint une température de 2179K à $x/L=0.40$. Bien qu'un décalage entre les deux flammes soit observé, dont, un décalage de $\Delta(x/L) = +0.15$ pour la flamme H₂/air par rapport à la flamme H₂/O₂.

De plus, il a été constaté que pour $0,64 \leq x/L \leq 1$, les valeurs de température des cas numériques sont proches les unes des autres, y compris la température du cas H₂/O₂ aux températures les plus élevées par rapport au cas H₂/air, mais seulement avec un décalage $\Delta T=91K$.

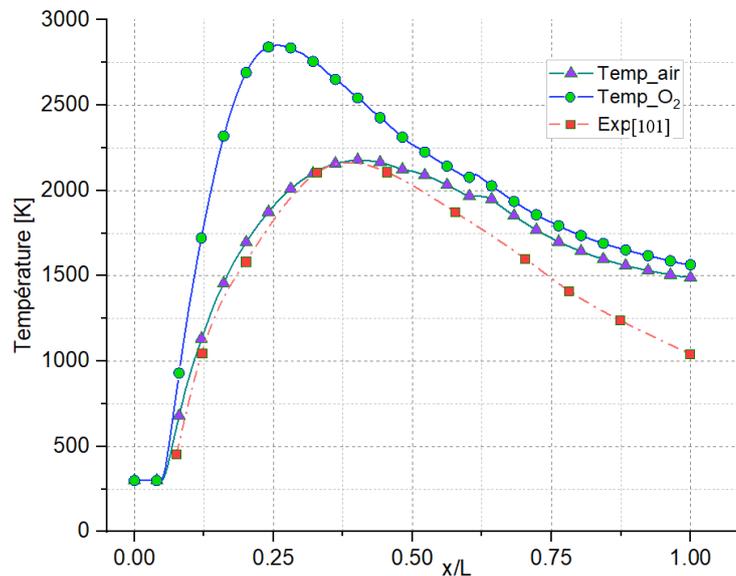


Figure 5-25 : Profils de température selon la direction axiale pour H₂/O₂ et H₂/air.

Les résultats montrent des variations notables dans les profils de flamme pour les cas de flamme de diffusion de type H₂/air et H₂/O₂, comme le montrent les distributions de température dans la chambre de combustion présentées dans la figure 5-26 (a) et (b).

Il est évident que le profil de flamme pour le cas de H_2/air présente un degré de dispersion plus élevé que celui du cas H_2/O_2 . Les variations observées dans la morphologie de la flamme entre les deux types de combustion soulignent l'influence significative de la composition de l'oxydant sur la dynamique globale de la flamme.

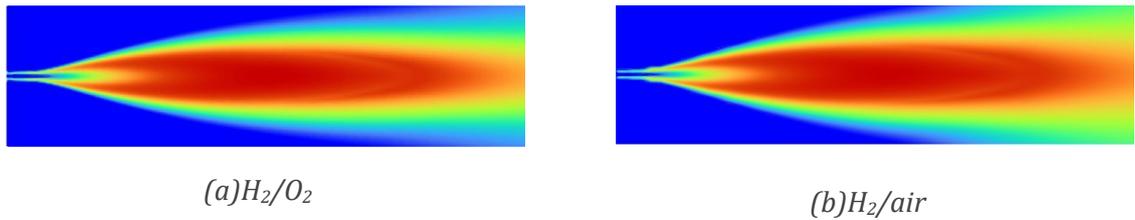


Figure 5-26 :: Profils de température pour H_2/O_2 et H_2/air .

5.5.2.3.2 Déplétion du H_2 et O_2 :

La figure (5-27) illustre les caractéristiques de combustion de l'hydrogène lorsqu'il est combiné à différents agents oxydants, en particulier l'air et l'oxygène pur O_2 . Ces caractéristiques sont représentées dans deux graphiques de profil distincts, l'un pour le mélange hydrogène-oxygène (H_2/O_2) et l'autre pour le mélange hydrogène-air (H_2/air).

Le constat d'examen de ces graphiques, en particulier pour ceux des profils de déplétion de l'hydrogène, montre un chevauchement évident dans la première partie des courbes, plus précisément dans la zone où le rapport $x/L \leq 0,11$. Cela implique une similitude des caractéristiques de combustion de l'hydrogène dans les deux cas d'étude. Cependant, au-delà de cette plage, en particulier dans le segment où $0,11 < x/L \leq 0,48$, une divergence significative dans le comportement pour les deux cas est évidente ; au cours de cette phase, on observe que le taux de consommation d'hydrogène dans le mélange H_2/O_2 est nettement inférieur à celui du mélange H_2/air . Cela indique que l'utilisation plus efficace de l'hydrogène est en présence d'oxygène pur. Cette différence de taux de consommation d'hydrogène entre les deux mélanges pourrait être attribuée aux différentes concentrations d'oxygène et à l'impact qui en résulte sur la dynamique et l'efficacité de la combustion.

L'observation précédente montre que la combustion de l'hydrogène est plus rapide et plus efficace lorsque ce dernier est associé à l'oxygène pur, ce qui entraîne une libération d'énergie plus importante. Cette libération d'énergie accrue se traduit par une flamme plus intense et plus concentrée.

En revanche, dans le cas de la combustion H_2/air , la présence d'un déficit d'oxygène limite la réaction de combustion de l'hydrogène, ce qui se traduit par une consommation plus élevée de carburant et une production d'énergie moindre. La flamme dans ce cas est plus lente et moins intense en raison de la limitation de l'apport d'oxygène.

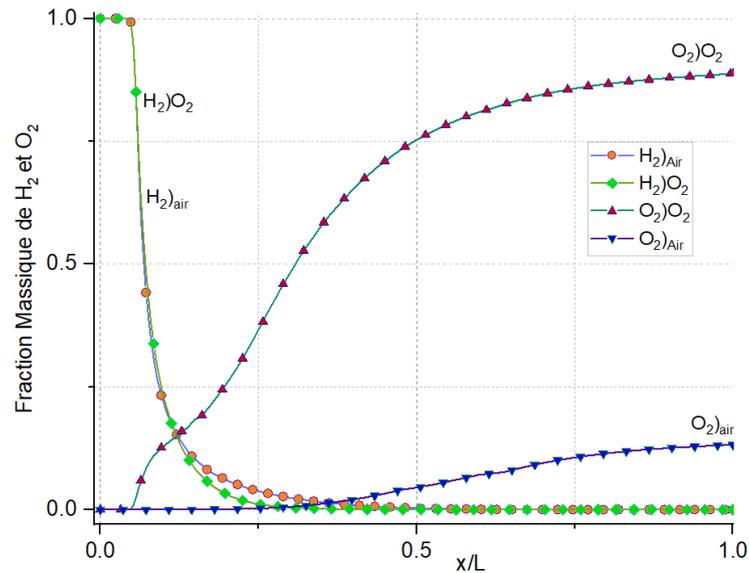


Figure 5-27 : Profils de consommation de H_2 et O_2 selon la direction axiale pour H_2/O_2 et H_2/air .

5.5.3 Analyse comparative de l'effet de vitesse d'injection de l'oxydant sur les paramètres d'une flamme de diffusion type H_2/O_2 et H_2/air :

5.5.3.1 Profils de températures :

Les figures 5-28 (a) et (b) illustrent les profils de température obtenus pour les différentes vitesses d'injection d'air et d'oxygène. Il a été remarqué que les variations de température présentent des tendances similaires en termes de forme et d'amplitude. Cependant, il convient de souligner qu'une comparaison des courbes les uns aux autres présentent une légère dispersion de température apparaît au-delà des maxima des graphs de température, dans le cas de l'air, pour $x/L=0,35$ et $x/L=0,25$ pour le cas d'oxygène. Cependant, cette dispersion disparaît à la sortie de la chambre de combustion, où toutes les valeurs de température se stabilisent autour de 1000K. Ces résultats suggèrent que la température à la sortie de la chambre de combustion est relativement uniforme et peu affectée par les variations de vitesse d'injection du comburant quoi que ce soit d'air et d'oxygène.

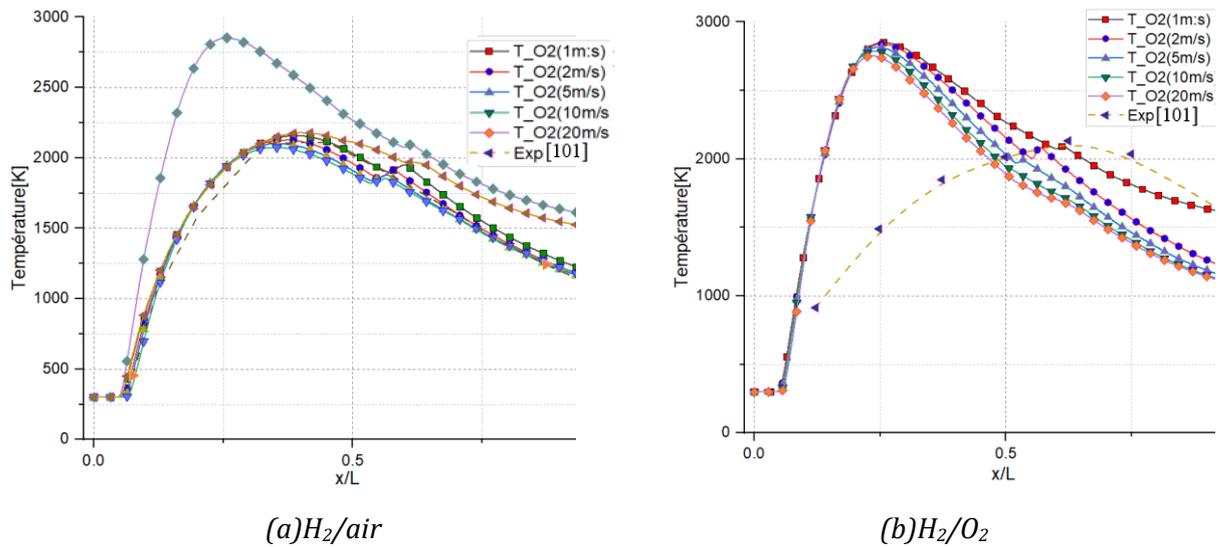


Figure 5-28 : Profils de température pour différentes vitesses d'injection du comburant.

Le tableau 5.6 ci-après, présente les profils des flammes associés à différents taux d'injection d'oxydant. Bien que l'influence du taux d'injection d'oxydant sur la structure de la flamme puisse sembler minime, il est évident que les différentes vitesses d'injection d'oxydant affectent notablement la configuration de la flamme.

Vitesse d'injection	H ₂ /air	H ₂ /O ₂
1m/s		
2m/s		
5m/s		
10m/s		
20m/s		

Table. 5-6 : comparaison de profils de température pour une flamme de diffusion type H₂/air et H₂/O₂ pour différentes vitesses d'injection du comburant

5.5.3.2 Comparaison de consommation de H₂ et O₂ pour le cas H₂/O₂ et H₂/air :

Les graphes (5-29a) et (b) présentent les variations de la consommation d'hydrogène et d'oxygène lors de la combustion. Les résultats issus des simulations numériques mettent en évidence l'impact de la vitesse d'injection de l'oxydant, en particulier dans le cas de la combustion H₂/air.

Plus spécifiquement, la figure 5-29(a), montre que la consommation d'hydrogène commence à décroître de manière significative à partir de $x/L=0,08$. De plus, au-delà de $x/L=0,10$, les courbes présentent une consommation d'hydrogène assez importante, ceci traduite par une forte baisse de la fraction massique qui a chuté de 1 à $x/L=0,8$ à 0,2 à $x/L=0,10$, dont l'angle de la pente des graphes est de $88,57^\circ$. En revanche, la consommation d'air est inversement proportionnelle à la consommation d'hydrogène, bien que cette relation soit caractérisée par une évolution plus modérée.

En outre, il a été noté que les graphiques de consommation d'hydrogène sont légèrement décalés les uns par rapport aux autres, avec un écart minimal ne dépassant pas 0,02 pour l'ensemble des valeurs de vitesse examinées. En revanche, cet écart augmente progressivement pour la consommation d'oxygène à partir de $x/L=0,2$.

Une autre observation concernant la fraction massique de l'oxygène dans l'air, qui se situe à environ 0,175, à proximité des 21% de dioxygène dans l'air, en raison de la prédominance de l'azote (N₂) qui représente 79% du volume de l'air. La présence de l'azote, bien qu'elle n'ait pas d'impact direct sur les réactions de combustion, mais elle est responsable de effet de dispersion de la température dans la chambre de combustion, comme le montrent les graphiques du tableau 5-6.

Une comparaison des données présentées ci-dessus avec le graphique de la figure 5-29(b) montre que la consommation d'hydrogène est fortement accélérée dans le cas de la combustion H₂/O₂ par rapport au cas de la combustion H₂/air. En outre, le calcul du volume d'hydrogène consommé pour chaque cas, montre que la quantité d'hydrogène consommée dans le cas H₂/O₂ est nettement inférieure à celle consommée dans le cas H₂/air. Il est important de noter qu'à la lumière des graphiques illustrant la distribution des températures qui peuvent être vus dans la figure 5-30 qui montre que des températures plus élevées sont enregistrées pour le cas H₂/O₂. Ceci permet d'expliquer pourquoi le cas H₂/O₂ à une meilleure efficacité énergétique en comparant avec le cas H₂/air.

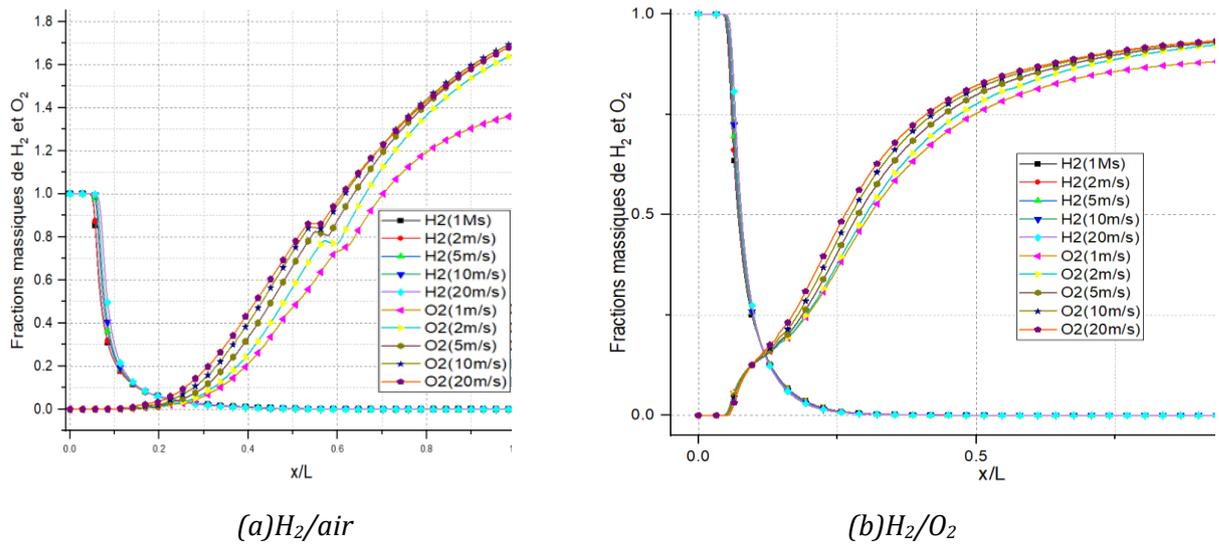


Figure 5-29 : Graphs de consommation de H₂ et O₂ pour différentes vitesses d'injection du comburant.

5.5.3.3 Comparaison de formation du OH et H₂O pour le cas H₂/O₂ et H₂/air

Le radical hydroxyle, noté OH, joue un rôle très important dans le processus de combustion. Cet agent très réactif contrôle les réactions chimiques en chaîne pendant la combustion, en raison de sa capacité à déclencher et à guider ces phénomènes. C'est pourquoi le radical OH est une espèce clé pour comprendre et maîtriser les processus de combustion.[111][112]

Les courbes de la figure 5-30(a) et (b) montrent la production de radicaux d'hydroxyles (OH) et d'eau (H₂O) dans deux contextes différents, à savoir la combustion d'hydrogène (H₂) avec de l'air et de l'oxygène (O₂), respectivement. Les courbes de production des radicaux OH et de l'eau (H₂O) sont représentées par paire. L'analyse de ces courbes montre que la formation de radicaux OH et d'eau est beaucoup plus importante dans le cas du cas H₂/O₂ que dans celui du cas H₂/air. Cette différence est statistiquement significative. Malgré le fait que notre étude s'étale pour des valeurs des vitesses d'injection allant de 1m/s à 20m/s, il est intéressant de noter que l'influence des différentes vitesses d'injection du comburant (de l'air ou d'oxygène) était plutôt insignifiante dans chacun des cas étudiés. Cette observation exige que d'autres paramètres ou mécanismes chimiques peuvent avoir une influence plus prépondérante sur la production de radicaux OH et d'eau dans ces conditions spécifiques de combustion

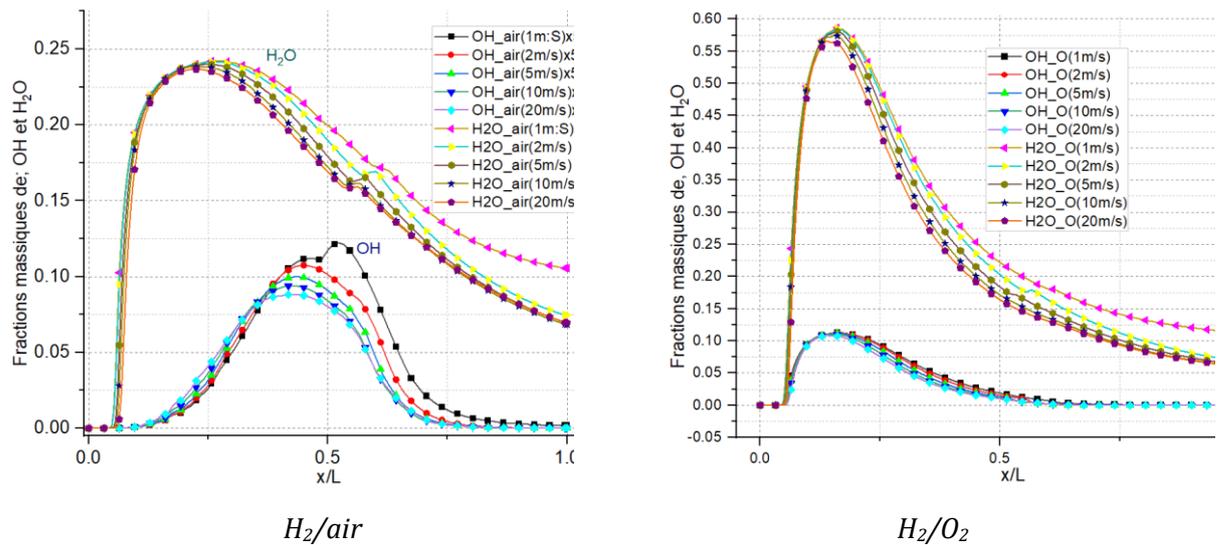


Figure 5-30: Graphs de production de H_2O et OH pour différentes vitesses d'injection du comburant.

La figure (5-31) suivante décrit les profils des fractions massiques de H_2O et OH sur l'axe de chambre de combustion. Il est remarquable que la fraction massique de H_2O et la fraction massique de OH pour le cas de la combustion H_2/O_2 présentent des valeurs nettement inférieures à celles du cas H_2/air . La représentation graphique de la figure (5-27) montre une disparité significative entre la fraction massique du OH prédite par l'approche numérique proposée pour cas H_2/air et la fraction massique du OH expérimentale [101]. Plus précisément, la simulation numérique tend à surestimer la production du OH , comme le montrent les valeurs plus élevées de la fraction massique du OH par rapport aux résultats expérimentaux rapportés par K. Fukumoto [101]. Cette divergence implique que l'approche numérique proposée ne capture pas le phénomène physique de la formation du OH dans le processus de combustion.

En outre, l'analyse des valeurs maximales affichées par les courbes de production du OH correspondant aux cas de H_2/O_2 , H_2/air et les résultats expérimentaux démontre des distinctions notables. Il convient de noter que la courbe relative au cas H_2/O_2 présente une ressemblance en termes de grandeurs avec celles des résultats expérimentaux, les sommets des deux courbes étant situés dans la plage de $0,5 < x/L < 0,75$. En revanche, le cas H_2/air présente une courbe de crête qui s'étend dans la plage de $0,1 < x/L < 0,25$. La dissemblance observée dans la courbure des graphs implique des disparités notables dans la dispersion spatiale de la génération du OH entre les deux catégories de combustion. Les résultats susmentionnés soulignent la nécessité d'améliorer la compréhension des mécanismes de génération du OH dans chaque scénario et d'améliorer nos modèles de calcul afin de reproduire plus précisément les résultats expérimentaux et d'obtenir une représentation plus précise de la synthèse du OH dans les flammes composées de H_2/O_2 et de H_2/air .

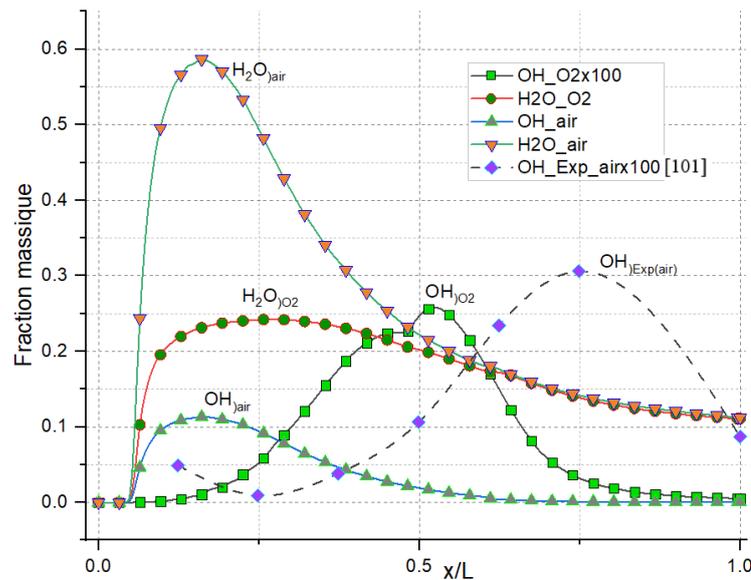


Figure 5-31: Profils de production de OH et H₂O pour H₂/O₂ et H₂/air.

5.6 Influence du régime instationnaire sur le comportement de la flamme :

Dans cette section de la thèse, nous entreprenons une première analyse d'une flamme de diffusion de type H₂/air, caractérisée par un régime turbulent et instationnaire. Pour cela, nous avons adopté l'approche de modélisation URANS (*Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes*). Ce modèle de turbulence est couramment utilisé tant par les chercheurs que par les professionnels de l'industrie pour réaliser des simulations numériques. L'un des principaux avantages du modèle URANS réside dans sa capacité à fournir des prédictions numériques suffisamment précises tout en requérant des ressources de calcul relativement modérées, en comparaison avec d'autres modèles de turbulence comme les modèles LES ou DNS.

5.6.1 Modélisation numérique

Pour les simulations transitoires, les équations dépendant du temps ont été discrétisées à l'aide d'un schéma de discrétisation temporelle du premier ordre. Cela implique l'intégration de chaque terme des équations différentielles sur un pas de temps Δt . La discrétisation spatiale pour les équations dépendantes du temps était identique au cas de l'état stationnaire qui est déjà étudié auparavant de ce chapitre.

Le pas de temps a été choisi entre 0,01 et 0,03 seconde, et le nombre de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) a été maintenu à un maximum de 1 pour tous les cas.

5.6.2 Modèle de PDF

Dans les écoulements de combustion turbulents, deux effets clés de l'interaction turbulence-chimie doivent être pris en compte. Le premier effet est l'amélioration du mélange carburant-air, qui est modélisé et pris en compte dans les modèles RANS par la prise en compte de la viscosité turbulente et de la diffusivité turbulente.

Le deuxième effet de l'interaction turbulence-chimie est lié à l'erreur de commutation. Cette erreur provient de l'écart entre le taux de réaction moyen et le taux de réaction estimé à l'aide des compositions moyennes dans les simulations RANS[67] [113].

5.6.3 Discussion des résultats

5.6.3.1 Prédiction de la température

La figure (5-32) représente les résultats de la simulation numérique pour trois différents modèles de turbulences ; les graphiques représentent la distribution de la température le long de l'axe central de la chambre de combustion qui ont été comparées aux résultats expérimentaux. Il a été constaté que la température ne présente pas le même comportement pour tous les modèles de turbulence étudiés.

On distingue trois régions de température le long de l'axe principal du brûleur :

1/ La première est pour $0 \leq x/L \leq 0,25$, où il y a une bonne concordance entre la prédiction de la température pour les quatre modèles de turbulence et ceux issues des résultats expérimentaux, à savoir le modèle EDC [101] [100], le modèle URANS : RMS/PDF20 et le modèle URANS : SST-K- ω .

2/ Pour $0.25 \leq x/L \leq 0,8125$; les courbes de température sont très différents et même leurs sommets ne se trouvent plus sur la même abscisse mais on constate que les deux sommets pour les résultats sont celles de la simulation RMS/PDF20 sont trouvées sur $x/L=0,6875$ alors qu'une différence de température $\Delta T=250K$ en faveur de la simulation numérique. Bien que les températures max de RMS/PDF20 est sensiblement identique à celle du modèle EDC mais avec un décalage $\Delta(x/L) = 0,125$.

3/ Les courbes présentent des pentes négatives qui sont interprété par une diminution de température. Pour $x/L=1$, sortie de la chambre de combustion, on constate qu'il y a une bonne concordance entre le modèle RANS/SST-K- ω et les résultats expérimentaux dont, l'écart de la température entre l'expérimental et ces modèles de turbulence ne dépasse pas 84K.

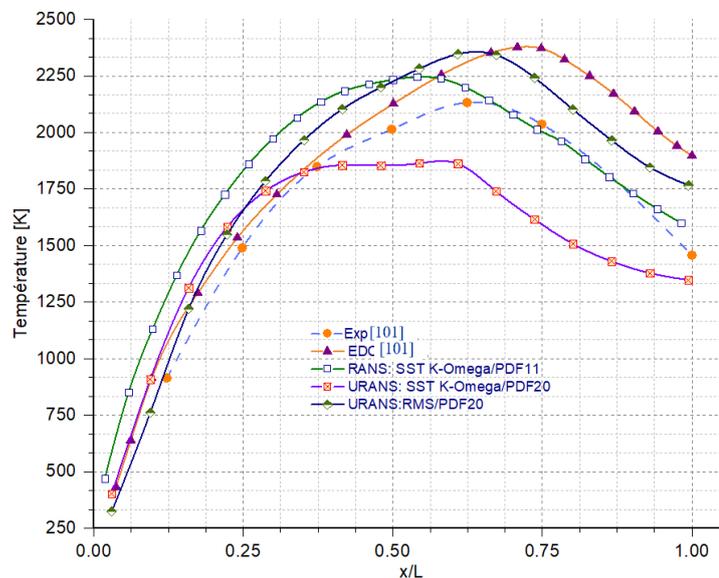


Figure 5-32 : Profils de température pour une flamme H_2 /air pour différents modèles de turbulence.

Les résultats de la figure 5-33(a) et (b) illustrent les variations de la vitesse du jet d'hydrogène dans les directions axiale et radiale. Dans le graphique (a), En observant une diminution significative de la vitesse du jet d'hydrogène qui chute brusquement de 302m/s pour $0.012 \leq x/L \leq 0.05$ à 123.5m/s pour $x/L = 0.11$. Cette diminution mis en évidence par une

tangente négative d'une valeur de -89° . Par la suite, la vitesse du jet d'hydrogène diminue progressivement, atteignant finalement une valeur de 32m/s à $x/L = 1$.

Pour la figure 5.33(b), représentant la vitesse radiale du jet d'hydrogène, on observe qu'à $x/L = 0.0040$, la vitesse radiale est de -6 m/s, ce qui indique un écoulement dirigé vers l'intérieur. Par la suite, le comportement du jet évolue, présentant un pic de vitesse de 70 m/s à $x/L = 0.064$. Au-delà de ce point, la vitesse radiale du jet décroît progressivement, pour atteindre finalement 0 m/s lorsque x/L dépasse 0.25.

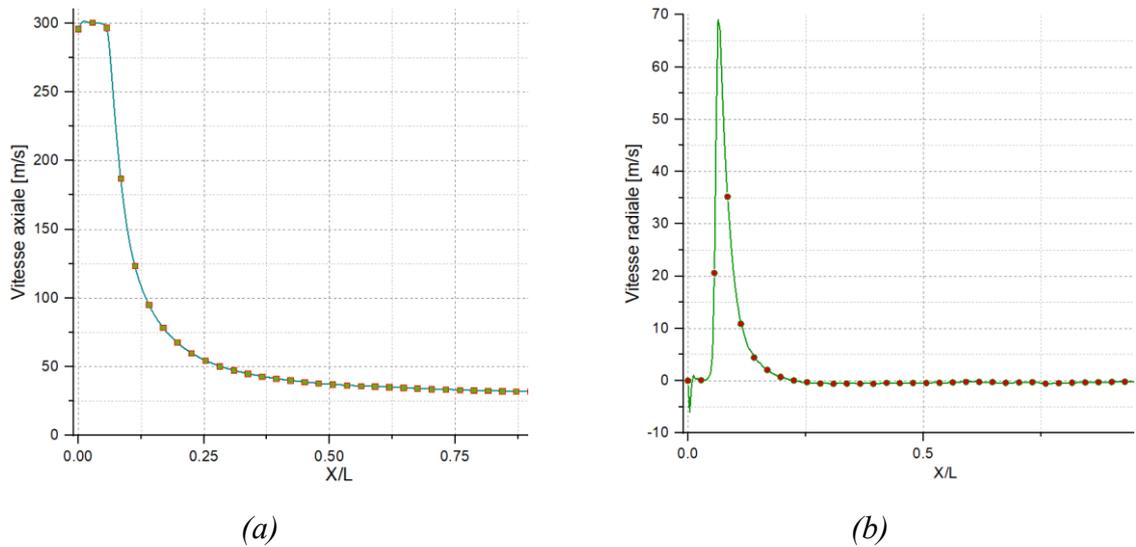


Figure 5-33 : Vitesse d'hydrogène selon la direction axiale et radiale dans la chambre de combustion

La Figure (5-34) illustre une représentation graphique des caractéristiques comportementales observées dans la flamme au cours du régime transitoire. Les données contenues dans l'image soulignent un modèle cohérent dans la façon dont la flamme s'étend sur l'ensemble du domaine de calcul. Il est important de noter que cette tendance est clairement évidente à la fois dans la direction longitudinale comme dans la direction transversale.

La flamme observée sur les photographies acquises a été analysée à l'aide d'une méthodologie systématique, qui comprenait la collecte de données à des intervalles réguliers de 0,060 seconde. Au cours de l'analyse de l'évolution de la flamme, il a été observé que deux modes distincts régissent le comportement de la flamme.

Durant la phase initiale, qui a duré de 0 à 0,90second, on a observé que le front de flamme traversait toute la zone longitudinale de la chambre de combustion de manière rapide et uniforme. De plus, nous avons observé une corrélation directe entre la longueur de la flamme L_f et le temps t pendant la phase de propagation de la flamme ; cette corrélation est représentée par l'équation linéaire $L_f = v_f \cdot t + L_0$. Dans ce contexte, v_f représente la vitesse de propagation de la flamme, L_0 représente la longueur initiale de la flamme, qui est initialisée à zéro à $t = 0$ second. Les observations susmentionnées soulignent la complexité de la dynamique de flamme qui caractérise la propagation de flamme au cours de la période de temps spécifiée.

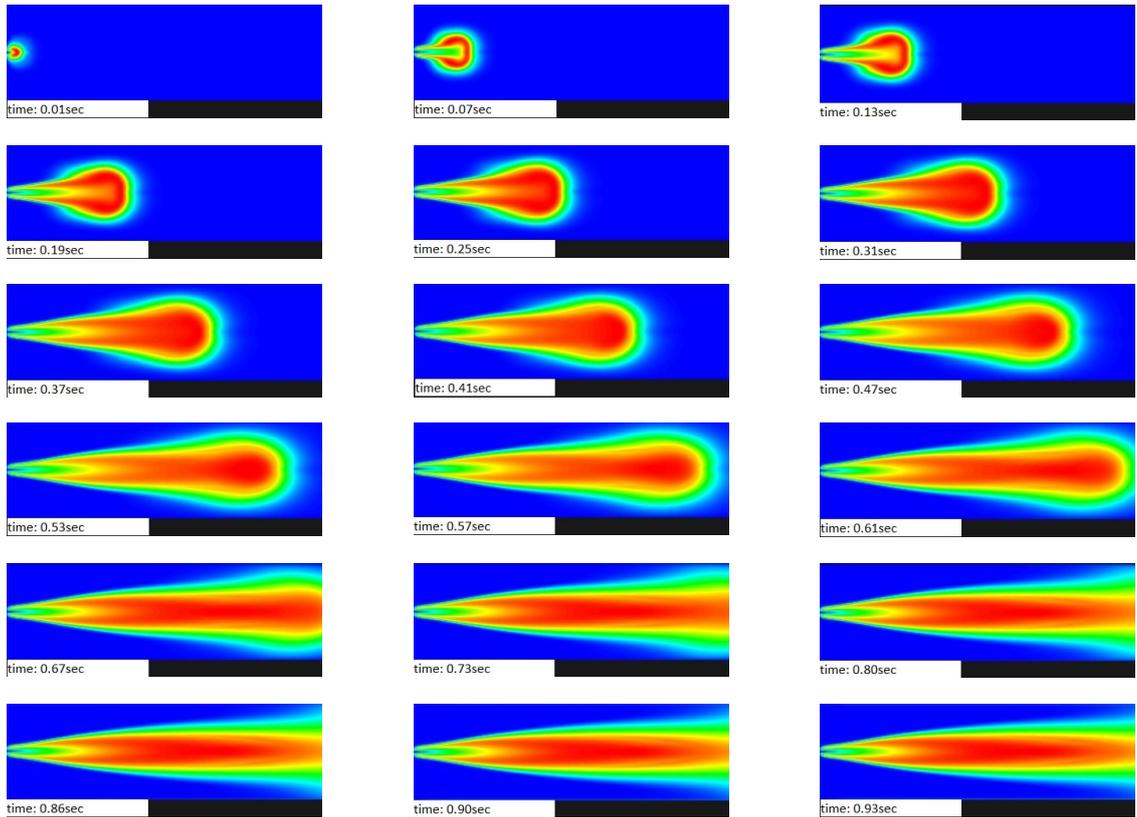


Figure 5-34 : Profils de température en fonction du temps

Dans la deuxième phase, qui est nettement plus courte que la première phase. Une observation importante concernant le comportement de la flamme au-delà de 0,90seconde. Dont, il est remarqué que le volume de la flamme commence à se rétrécir en s'éloignant des parois de la chambre de combustion. Cette transition s'est produite à $t = 0,93$ seconde, moment où la flamme adopte une forme indépendante du temps, ce qui indique qu'elle est entrée dans un régime stationnaire. Ces résultats revêtent une grande importance, car ils suggèrent que le phénomène de propagation de la flamme observé lors de la phase initiale ne se maintient pas sur de longues périodes de temps. Cette transition vers un régime stationnaire met en évidence la dynamique complexe de la combustion et souligne la nécessité d'études approfondies pour comprendre les mécanismes sous-jacents à ces changements de comportement. La figure (5-35) présente le profil de la flamme au-delà de $t=0.90s$.

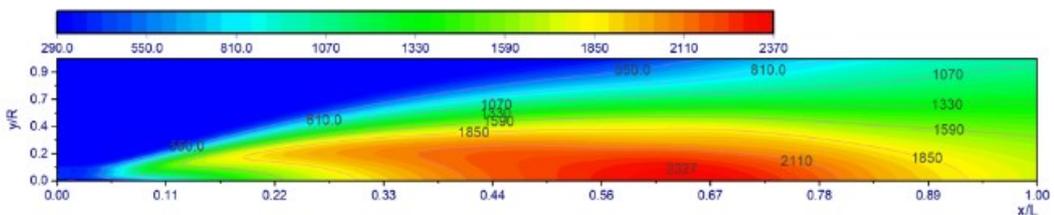


Figure 5-35 : Profil de la flamme au-delà de 0,90 seconde

La validation de ce résultat a été réalisée en le comparant avec les simulations RANS présentées dans notre article mené par [99]. Cette comparaison confirme la pertinence des résultats obtenus et souligne leurs implications pour la conception et l'exploitation des systèmes

de combustion. Dans de nombreux cas, il est crucial d'assurer une propagation stable de la flamme sur des périodes prolongées. Ainsi, la gestion et le contrôle précis des conditions de combustion deviennent des éléments déterminants pour garantir un fonctionnement optimal et sécurisé des systèmes de combustion. Ces résultats mettent en évidence la nécessité de prendre en compte les caractéristiques dynamiques de la flamme et de développer des stratégies de gestion adaptées pour améliorer les performances et assurer la fiabilité à long terme des systèmes de combustion.

Le graphique de la figure (5-36) ci-après, illustre la relation entre la longueur de la flamme et le temps. Le graphique montre que la longueur de la flamme augmente linéairement avec le temps au cours de la phase initiale de propagation de la flamme. Bien que le graphique montre qu'au cours de la première 0,01 seconde, la longueur de la flamme passe de 0mm à 122,73mm, ce qui indique que la flamme se propage rapidement. Après 0,23 seconde, la longueur de la flamme atteint 1022,71mm, ce qui indique que la flamme s'est propagée de manière significative pendant cet intervalle de temps. Sur la base des données présentées dans le graphique, la vitesse de propagation calculée de cette flamme est de 4091mm/s. Cependant, il est important de noter qu'au-delà de 0,90 seconde, la flamme ne se propage plus et le phénomène de propagation disparaît. Ceci montre que la flamme prend un état stationnaire après ce point.

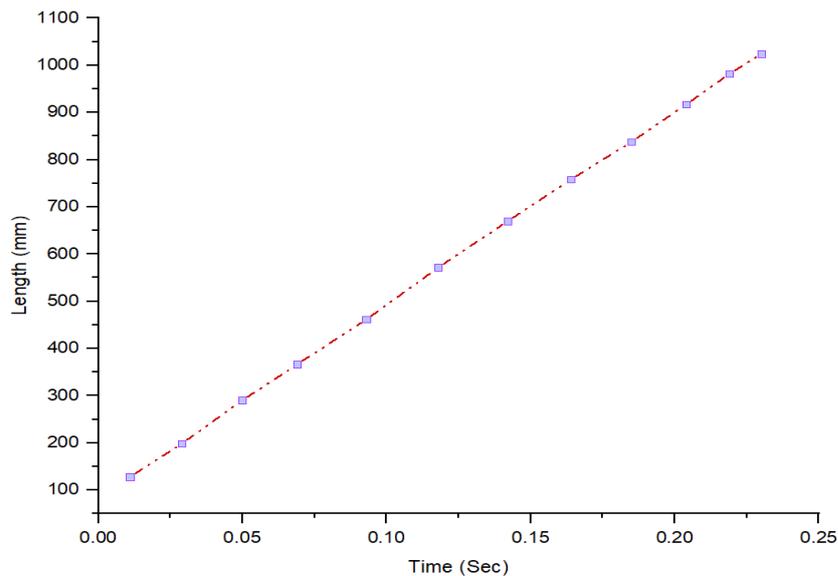


Figure 5-36 : Vitesse de propagation de flamme dans la direction longitudinale

La figure (5-37), ci-dessous, illustre une représentation complète de la méthodologie, qui consiste à utiliser d'une ligne droite unique pour relier tous les fronts de flamme capturés à un intervalle de temps de 0,05 seconde, dont. La linéarité continue de cette représentation confirme que la flamme maintient une vitesse de propagation uniforme et inchangée dans la direction transversale.

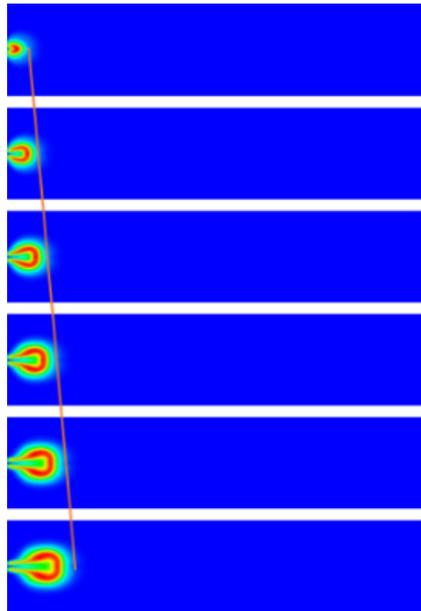


Figure 5-37 : Vitesse de propagation de flamme dans la direction transversale

La figure 5-38(a) met en lumière une dynamique asymétrique de propagation de flamme, caractérisée par une vitesse significativement plus lente dans la direction transversale comparativement à la direction longitudinale. Cette observation révèle un comportement préférentiel de propagation, où la flamme tend à se développer principalement selon l'axe longitudinal, en présentant des mécanismes complexes de transfert thermique et de réaction chimique qui favorisent une expansion sélective dans la direction longitudinale.

La figure 5-38(b) met en évidence un phénomène physicochimique remarquable de stabilisation de flamme qui n'est indépendant du régime de la combustion, il s'agit par l'ancrage de la flamme aux injecteur et sa propagation selon l'axe de la chambre de combustion. Ceci est démontré par le fait que la flamme est située au milieu de cette dernière.

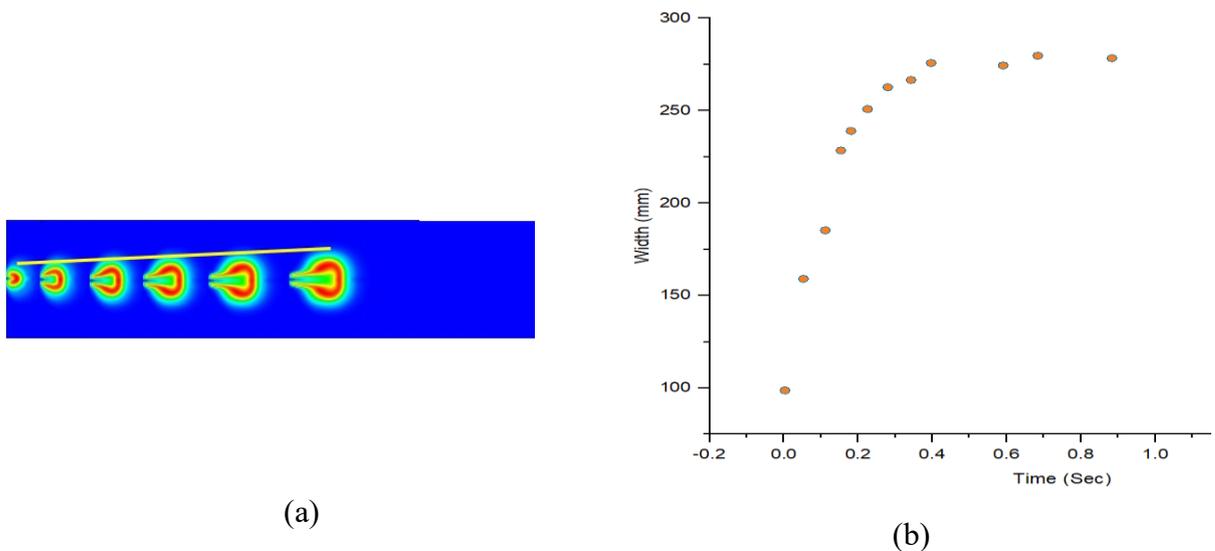


Figure 5-385 : Propagation de la flamme dans la direction transversale

5.7 Conclusion :

Ce chapitre met en évidence l'importance des conditions d'injection dans l'optimisation des performances des systèmes de combustion, en particulier en ce qui concerne la formation d'oxydes d'azote (NO_x). L'analyse expérimentale et théorique montrent que la prise en compte de la vitesse d'injection, de la concentration en hydrogène et de la teneur en oxygène de l'air influence directement l'efficacité du mélange hydrogène-air, favorisant une combustion plus homogène et réduisant ainsi la production de NO_x.

Les résultats obtenus montrent que l'interdépendance entre ces paramètres nécessite un contrôle minutieux afin d'atteindre une combustion optimale tout en minimisant les émissions polluantes. Un ajustement plus précis de des paramètres talque la vitesse d'injection, la température, le débit des réactifs permettent d'améliorer la performance énergétique des systèmes.

En plus, ces résultats revêtent une importance significative pour l'ingénierie des systèmes de combustion et au développement de technologies plus performantes et respectueuses de l'environnement. Bien qu'ils ouvrent également de nouvelles perspectives pour des recherches futures, visant à affiner les stratégies de régulation des paramètres d'injection, dans le but de mieux répondre aux défis environnementaux contemporains et de favoriser l'implémentation de solutions de combustion à faibles émissions de NO_x.

Conclusion générale

Conclusion générale :

L'étude des écoulements réactifs et des flammes turbulentes est un aspect déterminant dans le développement des systèmes énergétiques efficaces et respectueux de l'environnement. Dont, l'objectif c'est de réduire les émissions de gaz à effet de serre. La recherche scientifique sur les flammes se concentre sur la compréhension de l'interaction entre la turbulence et les réactions chimiques, ainsi que sur les effets critiques des paramètres d'injection sur la dynamique des flammes. Bien que l'étude ait privilégié l'efficacité numérique en utilisant des modèles de turbulence bien établis pour simuler une flamme de diffusion d'hydrogène, la stratégie méthodologique a intégré le compromis entre précision et performance. Des modèles plus complexes auraient potentiellement offert une résolution plus précise, mais au prix de temps de calcul relativement plus longs. Les modèles plus simples sélectionnés ont ainsi assuré un niveau de précision acceptable, permettant des simulations rapides et une exploration systémique des dynamiques de combustion.

Cette thèse met l'accent sur la nécessité d'adopter des pratiques énergétiques responsables et durables pour assurer le bien-être sociétal et environnemental à long terme. Elle se concentre sur l'étude de l'influence des conditions d'injection sur les flammes de diffusion d'hydrogène dans le but d'améliorer l'efficacité des systèmes énergétiques et de réduire leur impact sur l'environnement. En analysant ces flammes numériquement, la recherche vise à prédire leur comportement et à identifier les moyens d'optimiser les performances des brûleurs tout en minimisant les effets négatifs sur l'environnement. Les résultats mettent en évidence l'influence significative des conditions initiales d'injection sur le comportement de la flamme, suggérant que l'optimisation de ces conditions est indispensable pour une combustion efficace et propre. La recherche note également une différence de température substantielle entre les flammes d'hydrogène générées avec de l'oxygène pur et celles générées avec de l'air, ce qui indique la nécessité d'approfondir les recherches sur l'optimisation des processus de combustion pour différents oxydants.

Les résultats du chapitre 5 mettent l'accent sur le rôle critique des conditions d'injection dans le comportement de la flamme. La compréhension de ces processus fondamentaux est essentielle pour concevoir des systèmes de combustion sûrs et efficaces pour différents mélanges de combustibles. La recherche a montré que la vitesse d'injection a un impact significatif sur le comportement de la flamme. La concentration d'hydrogène diminue le long de la chambre tandis que l'oxygène augmente vers la sortie. Bien que dans la direction Radiale, l'hydrogène diminue en allant vers les parois tandis que l'oxygène s'approche d'un niveau constant. En outre, l'étude a examiné une flamme de diffusion air-hydrogène en régime transitoire en utilisant la technique URANS avec le modèle SST-k- ω . Cela a permis de prédire les profils de température et de réactifs le long de l'axe central du brûleur, donnant un aperçu des performances du système dans diverses conditions de combustion.

Cependant, l'interprétation des graphiques pour le régime URANS montre que pour les positions x/L entre 0,25 et 0,50, c'est le modèle RANS_SST- $k-\omega$ qui est le plus proche des résultats expérimentaux, ce qui indique que sa prédiction de la température est en bon accord avec les résultats numériques dans cette zone. Pour $x/L > 0,50$, tous les graphiques commencent à diverger les uns des autres, ce qui montre qu'une prédiction plus précise de la température devient de plus en plus difficile au fur et à mesure que l'on se déplace dans la direction radiale de chambre de combustion.

En plus, il a été remarqué qu'au cours de la phase initiale de propagation de la flamme, qui s'étend de 0 à 0,90 seconde, le front de flamme se déplace rapidement dans la direction longitudinale de la chambre de combustion. L'analyse des enregistrements séquentiels a permis de constater que la vitesse de propagation de la flamme reste constante et régulière dans la direction longitudinale, malgré la vitesse élevée du front de flamme. En outre, il a été observé qu'après 0,90 seconde, la flamme prend une forme constante indépendante du temps, mais aussi, elle présente les mêmes caractéristiques que celles obtenues dans le cas RANS, ce qui traduit par le passage de la flamme du régime transitoire au régime stationnaire.

Par conséquent, les résultats de cette étude soulignent l'efficacité des simulations numériques en tant qu'outil puissant pour comprendre et prédire le comportement des flammes de diffusion de type hydrogène. En contrepartie, en raison du temps de calcul nécessaire, souvent indispensable à la convergence de chaque cas de simulation, nous avons constaté qu'il nous était difficile d'effectuer des simulations supplémentaires en particulier pour la troisième instance en ce qui concerne le schéma réactionnel dont on a utilisé une PDF présumée au lieu d'une PDF transposée, cette dernière qui demande des ressources de calculs assez importantes.

En conclusion, Cette étude souligne la nécessité de poursuivre les recherches dans le domaine de la science de la combustion, en mettant particulièrement l'accent sur la dynamique et la propagation des flammes, ainsi que sur la formation d'oxydes d'azote (NOx) dans des conditions variables. La recherche vise à faire progresser le développement de systèmes de combustion capables de répondre efficacement et durablement à la demande croissante d'énergie propre dans le monde. En examinant l'interaction complexe entre les variables de combustion, l'étude vise à contribuer aux efforts en cours pour concevoir des systèmes de combustion qui équilibrent les performances et l'impact sur l'environnement.

Bibliographie

- [1] Arnout De Pee, Dickon Pinner, Roelofsen Occo, Ken Somers, Eveline Speelman, Maaïke Witteveen, “**Decarbonization of industrial sectors: the next frontier,**” 2018.
 - [2] Harsanyi, Endre, “**An overview of greenhouse gases emissions in Hungary,**” *J. Clean. Prod.*, vol. 314, Sep. 2021, doi: [10.1016/j.jclepro.2021.127865](https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.127865).
 - [3] A.S. Askarova, S. A. Bolegenova, *Physics of combustion*. Al-Faraby Kazakh National University, 2018.
 - [4] Williams, Forman A., *Combustion Theory*, 2nd editio. Taylor & Francis Group (CRC), 1985.
 - [5] MAarjorie W. Evans, M. Ablow, “**Theories of detonation,**” 1960, pp. 129–178.
 - [6] Bilger, R. W., *Turbulent Reaction Flows*, vol. Volume 44. 1980.
 - [7] Poinot Thierry, Veynante Denis, *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards. CNRs/Ecole Centrale Paris, 2005. doi: [10.1088/1751-8113/44/8/085201](https://doi.org/10.1088/1751-8113/44/8/085201).
 - [8] Charles E. baukal, Jr, *Combustion handbook*, 2nd editio., vol. 1. Taylor & Francis Group (CRC), 2012.
 - [9] El-Mahallawy Fawzy, Saad El-din Habik, *Fundamentals and technology of combustion*, 1,2002. Elsevier, 2002.
 - [10] Achintya, Mukhopadhyay and Sen Swarnendu, *Fundamentals of Combustion Engineering*. Taylor & Francis(CRC Press), 2019.
 - [11] Vasudevan Raghavan, *Combustion Technology Essentials of Flames and Burners*, vol. 4, no. 1. Athena Acadymic (WILEY), 2016.
 - [12] https://fr.wikipedia.org/wiki/Fichier:Combustion_methane.svg
 - [13] Raghavan, Vasudevan, *Combustion Technology*, 2nd editio. 2022. doi: [10.1007/978-3-030-74621-6](https://doi.org/10.1007/978-3-030-74621-6).
 - [14] Tupikin, Andrey, “**Hilbert-Optic Diagnostics of Hydrogen-Oxygen Inverse Diffusion Flame,**” *energies (MDPI)*, vol. 15, no. 9566, 2022, doi: <https://doi.org/10.3390/en15249566>.
 - [15] Mishra, Debi Prasad, *Advances in Combustion Technology*. Taylor & Francis Group (CRC), 2023. doi: [10.1201/9781003049005](https://doi.org/10.1201/9781003049005).
 - [16] Kenneth M. Bryden, Kenneth W. Ragland, Song-Charng Kong, *Combustion engineering*, 3rd editio., vol. 5, no. 3. Taylor & Francis Group (CRC), 2022.
 - [17] Dennis P. Nolan, *Handbook of Fire and Explosion Protection Engineering Principles for Oil, Gas, Chemical, and Related Facilities*, 4th editio. Gulf Professional Publishing (Elsevier), 2019.
 - [18] https://en.wikipedia.org/wiki/Flammability_diagram#/media/File:Flammability_diagram_methane.svg
-

- [19] <https://www.rdworltonline.com/what-are-bunsen-burners/>
- [20] Kenneth K. Kuo, Ragini Acharya, *Foundamentals of Turbulent and Multiphase of Turbulent Combustion*. John Wiley & Sons, Inc., 2012.
- [21] Ikeda, Yuji, Beduneau, Jean Luc, “**Attachment structure of a non-premixed laminar methane flame,**” *Proc. Combust. Institute(Elsivier)*, vol. 30, no. 1, pp. 391–398, 2005, doi: [10.1016/j.proci.2004.08.165](https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.165).
- [22] Glassman, Irvin and Richard A. Yetter, *Combustion*, 4th editio., vol. 21, no. 1. Elsevier, 2008.
- [23] Lacour, Corine, “**Stabilité de flammes laminaires partiellement premelangees - Application aux bruleurs domestiques,**” Ecole doctorale SPMII, 2006.
- [24] [https://ukdiss.com/examples/laminar-diffusion-flames.php#_Toc482249869.](https://ukdiss.com/examples/laminar-diffusion-flames.php#_Toc482249869)”
- [25] Piffaretti, Stefano Giuseppe, “**Flame Age Model: a transient laminar flamelet approach for turbulent diffusion flames,**” Swiss Fediral Institut of Technology, Zurich, 2007.
- [26] Bonart, H., “**Implementation and Validation of a Solver for Direct Numerical Simulations of Turbulent Reacting Flows in OpenFOAM,**” Karlsruhe Institute of Technology, 2012.
- [27] Schmutz, Hans A., “**Effects of Damköhler number on flame extinction and reignition in turbulent non-premixed flames using DNS,**” *Combust. Flame*, vol. 158, no. 5, pp. 949–963, 2011, doi: [10.1016/j.combustflame.2010.10.027](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.10.027).
- [28] Galmiche, Bénédicte, “**Caractérisation expérimentale des flammes ammes laminaires et turbulentes en expansion,**” Université d’Orléans, 2014.
- [29] Wang, AerotechniqueD E. Mecanique E. T. DXiaodong, “**Modélisation et simulation numérique de la combustion en présence d’interactions flammes/auto-inflammation,**” Ecole Doctorale : Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique, 2020.
- [30] Pepiot, Perrine, “**Prediction of flame structure and pollutant formation of Sandia flame D using Large Eddy Simulation with direct integration of chemical kinetics,**” *Combust. Flame*, vol. 188, pp. 180–198, Feb. 2018, doi: [10.1016/j.combustflame.2017.08.028](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2017.08.028).
- [31] Bilger, R. W., “**Turbulent Flows with Nonpremixed Reactants,**” *Turbul. React. flows*, pp. 65–113, 1980, doi: [10.1007/3540101926_9](https://doi.org/10.1007/3540101926_9).
- [32] Lam, S. H. and J. Bellan, “**On de-coupling of Shvab-Zel’dovich variables in the presence of diffusion,**” *Combust. Flame*, vol. 132, pp. 691–696, 2003, doi: [10.1016/S0010-2180\(02\)00519-9](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(02)00519-9).
- [33] Pham, Minhhieu, “**Numerical investigation on the combustion characteristics of non-premixed hydrogen-air in a novel micro-combustor,**” *Appl. Therm. Eng.*, vol. 110, pp. 665–677, 2017, doi: [10.1016/j.applthermaleng.2016.08.210](https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2016.08.210).
- [34] F. Fendell, F. Wu, “**Unsteady Planar Diffusion Flames Ignition, Travel, Burnout,**” *TRW Sp. Electron. Gr.*, vol. i, no. d, pp. 357–362, 2000, doi: [N96-15607](https://doi.org/10.1016/0014-3045(00)00156-7).

- [51] Guézengar, Dominique, “**Modélisation et simulation de la turbulence compressible dans les écoulements cisailés supersoniques,**” Université de la Méditerranée, 1997.
- [52] F., Lewis Richardson, *Weather Prediction by numerical process*, vol. 6, no. August. 1922.
- [53] Frederick, Donald Jerome, “**Numerical Investigations of a Hydrogen Jet Flame in a Vitiated Coflow by,**” 2013.
- [54] Williams, F. A. .., “**Combustion theory and modeling,**” *Proc. Combust. Inst.*, vol. 30, no. 1, pp. 1–19, 2005, doi: [10.1016/j.proci.2004.08.280](https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.280).
- [55] Badr, Hassan M., *Green Energy and Technology Oxyfuel Combustion for Clean Energy Applications*. Springer, 2019.
- [56] LUCA, Giunio DE, “**Développement de modèles dynamiques pour la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente non-prémélangée,**” Université Paris VI, 2021.
- [57] Poinso, Thierry, “**Direct numerical simulation of heat release and NO(γ) formation in turbulent nonpremixed flames,**” *Combust. Flame*, vol. 119, no. 1–2, pp. 69–83, 1999, doi: [10.1016/S0010-2180\(99\)00044-9](https://doi.org/10.1016/S0010-2180(99)00044-9).
- [58] Thierry, Poinso, Denis, Veynante, *Theoretical and Numerical Combustion*, 3rd editio. CNRS/Ecole Centrale Paris, 2012.
- [59] Senouci, M., Bounif, A., Abidat, M., N., M. Belkaid, Mansour, C., Gokalp, I., “**Transported-PDF (IEM, EMST) micromixing models in a hydrogen-air nonpremixed turbulent flame,**” *Acta Mech.*, vol. 224, no. 12, pp. 3111–3124, 2013, doi: [10.1007/s00707-013-0911-5](https://doi.org/10.1007/s00707-013-0911-5).
- [60] Nelissen, M. M., “**Modelling differential diffusion in turbulent non-premixed hydrogen flames,**” TUDelft University, 2021.
- [61] Abraham, John; Magi, Vinicio, “**Computations of transient jets: RNG k-e model versus standard k-e model,**” *SAE Tech. Pap.*, no. 41 2, 1997, doi: [10.4271/970885](https://doi.org/10.4271/970885).
- [62] Han, Z; Reitz, R. D., “**Combustion Science and Technology Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines Using RNG $\kappa - \epsilon$ Models Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines,**” *Combust. Sci. Technol.*, vol. 106, no. 4–6, pp. 267–295, 1995, doi: <http://dx.doi.org/10.1080/00102209508907782>.
- [63] Menter, Florian R; Rumsey, Christopher L., “**Assessment of two-equation turbulence models for transonic flows field,**” *AIAA J.*, pp. 1994–2343, 1994, doi: [AIAA 94-2343](https://doi.org/10.2514/3.10041).
- [64] Wilcox, David C., “**Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models,**” *AIAA J.*, vol. 26, no. 11, pp. 1299–1310, 1988, doi: [10.2514/3.10041](https://doi.org/10.2514/3.10041).
- [65] Mangani, L., *The Finite Volume Method in Computational Rheology*, vol. 113. Springer, 2012. doi: [10.5772/38644](https://doi.org/10.5772/38644).
- [66] Tognotti, Leonardo, “**Numerical Modeling of Hydrogen Diffusion Jet Flame: the Role of the Combustion Model,**” *Combust. Flame*, no. May 2014, pp. 1–6, 2006.

- [67] Senouci, M., Benchatti, T., Bounif, A., Oumrani, N., Merouane H., “**A hybrid rans-rsm/composition pdf-transport method for simulation of hydrgen-air turbulent diffusion flame,**” *Int. J. Heat Technol.*, vol. 34, no. 2, pp. 268–274, 2016, doi: [10.18280/ijht.340216](https://doi.org/10.18280/ijht.340216).
- [68] Lindstedt, R. P., Louloudi, S. A., Váos, E. M., “**Joint scalar probability density function modeling of pollutant formation in piloted turbulent jet diffusion flames with comprehensive chemistry,**” *Proc. Combust. Inst.*, vol. 28, no. 1, pp. 149–156, 2000, doi: [10.1016/S0082-0784\(00\)80206-4](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(00)80206-4).
- [69] Lundgren, T. S., “**Model equation for nonhomogeneous turbulence,**” *Phys. Fluids*, vol. 12, no. 3, pp. 485–497, 1969, doi: [10.1063/1.1692511](https://doi.org/10.1063/1.1692511).
- [70] Pope, S. B., “**PDF methods for turbulent reactive flows,**” *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 11, no. 2, pp. 119–192, 1985, doi: [10.1016/0360-1285\(85\)90002-4](https://doi.org/10.1016/0360-1285(85)90002-4).
- [71] MAMERI, Abdelbaki, “**Etude Numerique De La Combustion Turbulente Du Premelange Pauvre Methane/Air Enrichi A L’hydrogene,**” École Doctorale Sciences Et Technologies Laboratoire Icare, CNRS Orleans, 2009.
- [72] Kefa;, Wang ZhHua; Fan JianRen; Zhou JunHu; Cen, “**Direct numerical simulation of hydrogen turbulent lifted jet flame in a vitiated coflow,**” *Chinese Sci. Bull.*, vol. 52, no. 15, pp. 2147–2156, 2007, doi: [10.1007/s11434-007-0290-1](https://doi.org/10.1007/s11434-007-0290-1).
- [73] A. Y. Klimenko, R. W. Bilger, “**Conditional moment closure for turbulent combustion,**” *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 9, no. 4, pp. 925–928, 1999.
- [74] Mazumder, Sandip, *Numerical methods for partial differential equations: Finite difference and finite volume methods*, vol. M. 2015.
- [75] Gubba, S. R., “**Large Eddy Simulation Of Premixed and Non-Premixed Combustion,**” in *Proceedings of the 37th National & 4th International Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power*, IIT Madras, Chennai, India, 2010.
- [76] Abramowitz, Milton, Irene, Stegun, *Handbook of Mathematics Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 10th editi. U.S. Government Printing Office, 1972.
- [77] Berg, Christian, Pedersen, Henrik L., “**Introduction to the Gamma Function,**” vol. 32, no. 2, 2002, pp. 507–525.
- [78] Peters, Norbert, Aachen, Rwth, *Turbulent Combustion. The Mathematics of Combustion*, 1985. doi: [10.1137/1.9781611971064](https://doi.org/10.1137/1.9781611971064).
- [79] Cheng, Ping, “**Two-dimensional radiating gas flow by a moment method,**” *AIAA J.*, vol. 2, no. 9, pp. 1662–1664, 1964, doi: [10.2514/3.2645](https://doi.org/10.2514/3.2645).
- [80] BENBOUAZIZ Oussama, “**Numerical simulation of the turbulent combustion of low calorific value fuels applied to the combustion chambers of gas turbines.**”
- [81] H K Versteeg and W. Malalasekera, *An Introduction To Computational Fluid Dynamics*, 2nd editio., vol. M, no. 1. PEARSON Prentice Hall, 2007.
- [82] Leveque, Randall J., *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, no. 1. Cambridge University Press, 2004.

- [83] Zienkiewicz, O C, Emeritus, Freng, *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*, 4th editio., vol. 3. Butterworth-Heinemann, 2014. doi: [10.1016/b978-1-85617-635-4.00018-2](https://doi.org/10.1016/b978-1-85617-635-4.00018-2).
- [84] Boonkkamp, J. .. H. M. ten Thijs, “**The conservation equations for reacting gas flow,**” 1993.
- [85] DENG, Xiong, “**LES of the Sandia flame series D-F using the Eulerian stochastic field method coupled with tabulated chemistry,**” *Chinese J. Aeronaut.*, vol. 33, no. 1, pp. 116–133, Jan. 2020, doi: [10.1016/j.cja.2019.09.022](https://doi.org/10.1016/j.cja.2019.09.022).
- [86] Lopes Junqueira Luís Fernando Figueira da Silva, Nicole, “**The influence of the learning data on the reduced order model of laminar non-premixed flames.,**” in *26th International Congress of Mechanical Engineering (COBEM)*, Mechanical Engineering Department, Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Brazil, 2021.
- [87] Li, Dong, Ihme, Matthias, “**Stability diagram and blow-out mechanisms of turbulent non-premixed combustion,**” *Sci.*, vol. 38, no. 4, pp. 6337–6344, 2021, doi: [10.1016/j.proci.2020.06.225](https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.225).
- [88] Kitamura, Keiichi, *Advancement of Shock Capturing Computational Fluid Dynamics Methods*, vol. M. Springer, 2020. doi: [10.1007/978-981-15-9011-5](https://doi.org/10.1007/978-981-15-9011-5).
- [89] Guerrero, Joel, “**Introduction to Computational Fluid Dynamics: Governing Equations, Turbulence Modeling Introduction and Finite Volume Discretization Basics.,**” 2015.
- [90] Eymard, Robert, Gallouët, Thierry, Herbin, Raphaële, Eymard, Robert, Gallouët, Thierry, Herbin, Raphaële, *Finite Volume Methods*, vol. M, no. Part 3. 2019.
- [91] Qian, L., *Introductory Finite Volume Methods for PDEs*, vol. 1. 2011. [Online]. Available: <http://thuvienso.bvu.edu.vn/handle/TVDHBRVT/15756>
- [92] Castro, Jordi Muela, “**Modelling and numerical simulation of combustion and multi-phase flows using finite volume methods on unstructured meshes Modelling and numerical simulation,**” Universitat Politècnica de Catalunya (UPC), 2018.
- [93] H.K. Versteeg, W. Malasekera, *An Introduction to Parallel Computational Fluid Dynamics*, vol. 6, no. 4. PEARSON Prentice Hall, 2005. doi: [10.1109/mcc.1998.736434](https://doi.org/10.1109/mcc.1998.736434).
- [94] Cenci, Fredi, Fugarra, André Luís Condino, “**Urans Simulations Using Openfoam,**” in *Proceedings of the XXXVIII Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering*, Universidade Federal de Santa Catarina, 2017. doi: [10.20906/cps/cilamce2017-0838](https://doi.org/10.20906/cps/cilamce2017-0838).
- [95] Jäger, Matthäus, *Fuel Tank Sloshing Simulation Using the Finite Volume Method*. Springer Spektrum, 2019.
- [96] Yakhot, Victor, Orszag, Steven A., “**Renormalization group analysis of turbulence. I. Basic theory,**” *J. Sci. Comput.*, vol. 1, no. 1, pp. 3–51, 1986, doi: [10.1007/BF01061452](https://doi.org/10.1007/BF01061452).

- [97] Jack P. Holman, John Lloyd, *An Introduction to Combustion, Concept and applications*, 2nd editio. McGraw-Hill, 2000.
- [98] Barlow, Robert S., “**Sandia H2/He Flame : Scalar Data**,” 2003.
- [99] Boukhelef, Mohamed, Alliche, Mounir, Senouci, Mohammed, Merouane, Habib, “**Numerical Study of the Injection Conditions Effect on the Behavior of Hydrogen-Air Diffusion Flame**,” *Therm. Sci.*, vol. 26, no. 5 Part A, pp. 3741–3750, 2022, doi: [10.2298/TSCI210530314B](https://doi.org/10.2298/TSCI210530314B).
- [100] Fukumoto, Kazui, Yoshifumi Ogami, “**Simulation of H2-Air Non-Premixed Flame Using Combustion Simulation Technique to Reduce Chemical Mechanisms**,” *Fluid Dyn. Comput. Model. Appl.*, vol. 11, no. tourism, p. 13, 2016.
- [101] Fukumoto, Kazui, Ogami, Yoshifumi, “**Simulation of H2-Air Non-Premixed Flame Using Combustion Simulation Technique to Reduce Chemical Mechanisms**,” *Fluid Dyn. Comput. Model. Appl.*, no. February, 2012, doi: [10.5772/27363](https://doi.org/10.5772/27363).
- [102] Sohn Hong Yong, Perez-Fontes, Silvia E., “**Computational fluid dynamics modeling of hydrogen-oxygen flame**,” *Hydrog. Energy*, vol. 41, no. 4, pp. 3284–3290, 2016, doi: [10.1016/j.ijhydene.2015.12.013](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.12.013).
- [103] Deutschmann, Olaf, Warnatz, Jürgen, Allendorf, Mark D., Kee, Robert J., Coltrin, Michael E., “**Modeling and Simulation of Hydrogen-Oxygen Combustion on Platinum Catalyst**,” *Energy Effic. Process Technol.*, pp. 862–871, 1993, doi: [10.1007/978-94-011-1454-7_76](https://doi.org/10.1007/978-94-011-1454-7_76).
- [104] Barlow, Robert S., Fiechtner, G. J., Carter, Campbell D., Flury, M., “**Sandia/ETH-Zurich CO/H2/N2 Flame Data - Release 1.1**,” 2002.
- [105] Senouci Mohammed, Bounif, Abdelhamid, Merouane, Habib, Boukhelef, Mohamed, “**A numerical investigation of effects of chemical kinetic mechanisms on the structure of turbulent jet diffusion H2/air flame with Lagrangian PDF method**,” *J. Mech. Eng. Sci.*, no. June, pp. 9507–9519, 2023, doi: [10.15282/jmes.17.2.2023.9.0753](https://doi.org/10.15282/jmes.17.2.2023.9.0753).
- [106] Muradoglu, Metin, “**A LES/PDF simulator on block-structured meshes**,” *Combust. Theory Model.*, vol. 23, no. 1, pp. 1–41, 2019, doi: [10.1080/13647830.2018.1475683](https://doi.org/10.1080/13647830.2018.1475683).
- [107] Essen van, Vincent Martijn, “**NO formation and destruction in laminar premixed hydrocarbon flames**,” *Fundam. limits NO Form. fuel-rich premixed methane-air flames*, pp. 5–30, 2007.
- [108] Bowman, C. T., “**Effect of chemistry and turbulence on NO formation in oxygen?natural gas ?ame**,” *Proc. Summer Progr.*, pp. 187–206, 1996.
- [109] Lixing ZHOU, *Theory and Modeling of Dispersed Multiphase Turbulent Reacting Flows*, vol. 6, no. August. 2018.
- [110] Williams, Alan, *Combustion of liquid fuel sprays*, vol. 28, no. 05. 1991. doi: [10.5860/choice.28-2741](https://doi.org/10.5860/choice.28-2741).
- [111] Fiala, Thomas and Thomas Sattelmayer, “**Heat release and UV–Vis radiation in non-premixed hydrogen–oxygen flames**,” *Exp. Fluids*, vol. 56, no. 7, pp. 1–15, 2015, doi: [10.1007/s00348-015-2013-8](https://doi.org/10.1007/s00348-015-2013-8).

- [112] Fiala, T. and T. Sattelmayer, “**Heat release and OH* radiation in laminar non-premixed hydrogen-oxygen flames,**” *51st AIAA Aerosp. Sci. Meet. Incl. New Horizons Forum Aerosp. Expo. 2013*, no. January, pp. 1–7, 2013, doi: 10.2514/6.2013-1170.
- [113] Vedovoto, Marcelo, “**URANS Simulation of Turbulent Non-premixed and Non-reacting Propane Jet Flow,**” in *12th Spring School on Transition and Turbulence Sept. 21st-25th, 2020 Blumenau, SC, Brazil*, Federal University of Uberlandia, Fluid Mechanics Laboratory-MFLab, 2020.

-ANNEXE- 1 : Activités scientifiques *(Articles)*

- home
- about
- founder & publisher
- editorial boards
- advisory board
- for authors
- call for papers
- archive
- online first
- editorial policy
- subscription
- participation fee
- advertising
- news
- links
- contacts



Mohammed Boukhelef, Mounir Alliche, Mohamed Senouci, Habib Merouane

Authors of this Paper
External Links

NUMERICAL STUDY OF THE INJECTION CONDITIONS EFFECT ON THE BEHAVIOR OF HYDROGEN-AIR DIFFUSION FLAME

ABSTRACT

In order to respond to the increased demand for clean energy without harming the atmosphere through polluting emissions, Energy production from the hydrogen combustion become largely used. This work presents a numerical study of the injection conditions effect on the structure of the H2-Air diffusion flame. The aim is to reproduce a practical case of non-polluting combustion and resulting in very high temperatures. The configuration is composed of two axisymmetric coaxial jets, as can be found in the diffusion burners. A presumed probability density function (PDF) approach is used to describe the chemistry-turbulence interaction. K-epsilon model of turbulence is used. Particular attention is given to phenomena anchoring or blowout of the flame.

KEYWORDS

diffusion flame, H2-air, PDF, turbulence, k-epsilon model, CFD

PAPER SUBMITTED: 2021-05-30

PAPER REVISED: 2021-08-21

PAPER ACCEPTED: 2021-09-22

PUBLISHED ONLINE: 2021-11-06

DOI REFERENCE: <https://doi.org/10.2298/TSCI210530314B>

CITATION EXPORT: [view in browser](#) or [download as text file](#)

THERMAL SCIENCE YEAR 2022, VOLUME 26, ISSUE Issue 5, PAGES [3741 - 3750]

REFERENCES

NUMERICAL STUDY OF THE INJECTION CONDITIONS EFFECT ON THE BEHAVIOR OF HYDROGEN-AIR DIFFUSION FLAME

by

**Mohamed BOUKHELEF^a, Mounir ALLICHE^{b*},
Mohammed SENOUCI^{a,c}, and Habib MEROUANE^a**

^aLaboratory of Physic Quantic and Mathematical Modelization of Matter (LPQ3M),
University of Mascara, Mascara, Algeria

^bRenewable Energy and Materials Laboratory (LERM), Faculty of Technology,
University of Medea, Medea, Algeria

^cHigher School in Electrical and Energy Engineering of Oran, USTO, Oran, Algeria

Original scientific paper

<https://doi.org/10.2298/TSCI210530314B>

In order to respond to the increased demand for clean energy without harming the atmosphere through polluting emissions, energy production from the hydrogen combustion become largely used. This work presents a numerical study of the injection conditions effect on the structure of the H₂-air diffusion flame. The aim is to reproduce a practical case of non-polluting combustion and resulting in very high temperatures. The configuration is composed of two axisymmetric coaxial jets, as can be found in the diffusion burners. A presumed probability density function approach is used to describe the chemistry-turbulence interaction. The k-ε model of turbulence is used. Particular attention is given to phenomena anchoring or blowout of the flame.

Key words: *diffusion flame, H₂-air, PDF, turbulence, k-ε model, CFD*

Introduction

The development of energy systems requires substantial support in terms of fossil resources. The activities inherent to domestic and industrial needs require the supply of fuels, the majority of which are hydrocarbons. In addition availability and cost issues, products derived from petroleum and natural gas provide great energy, but release large amounts of pollutants [1, 2]. As a result, the international community is turning to alternative fuels, offering good ecological performance at attractive production costs [3-6].

In this context, hydrogen appears to satisfy these criteria. In fact, it offers a low energy level at ignition and has a wide range of flammability, but still has the disadvantage of having a low density and to be very diffuse, which leads to technological problems, respectively related to sealing and storage [7, 8]. Although premixed flames are less polluting and more used in energy installations as diffusion flames, premixed hydrogen-air flame presents great risks of transition detonation and return of flames (flashback) [9-11].

As a fuel, hydrogen is involved in a several applications from internal combustion engines where it is mixed with natural gas, through gas turbines (mixed with methane) to (H₂-air) burners (low NO_x), and rocket engines (H₂-O₂) [12-15].

* Corresponding author, e-mails: alliche.mounir@univ-medea.dz; alliche_m@yahoo.fr

The aim of this investigation is to use CFD approach as an effective computer based simulation to study and develop the hydrogen combustion processes [16]. Several constraints can get involved to make an experiments of combustion not recommended where, these ones may cause a harmful danger to the entourage [2, 5]. For the hydrogen combustion case is even worse, due to the characteristics of the hydrogen substance itself. This is the reason why it is preferred to use a high fidelity computation systems [16-18]. The CFD and modelling techniques are becoming increasingly important tools to assess the impact of hydrogen combustion in the operating burners [2, 15]. Developments in the field of computer simulation would be extremely useful in predicting flames and combustion process, without the need for expensive and time-consuming field tests. However, the complete description of particle trajectories, chemistry reactions and energy production is needed. This numerical investigation is about making a numerical approach to comprehend how injection conditions can affect the hydrogen flame behavior which is dependent to the same geometric configuration [5, 16].

In the present study, the impacts of tube diameter and fuel velocity on combustion efficiency were examined. The present work mainly concerns the numerical simulation of the phenomenon of turbulent combustion, in a non-premixed flame of the H₂-air type. The aim is to produce a numerical investigation of non-polluting combustion and giving rise to very high temperatures (of the order of 2000 K) [19]. The studied configuration is composed of two co-axial axis-symmetric jets, such as can be found in diffusion burners. In this simulation, the *k-ε* turbulence model was used with a reduced chemical mechanism. We examine the effect of injection conditions on the structure of the diffusion flame, more specifically, speed, temperature and static pressure. We are particularly interested in the phenomena of attachment or blowing of the flame.

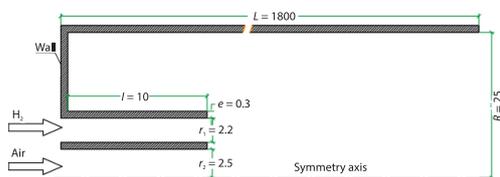


Figure 1. Geometrical configuration

N₂% = 78.992%) is sent via the axial injector at a temperature $T_{\text{air}} = 300$ K, with a turbulence intensity of the order of 15% which corresponds to a fluctuating speed given:

$$V'_{\text{air}} = \frac{15}{100} \bar{V} \quad (1)$$

The combustible stream (H₂% = 100%) is blown peripherally by the annular injector with an average speed $V_{\text{H}_2} = 200$ m/s and a temperature $T_{\text{H}_2} = 300$ K. The blowing is characterized by an intensity of turbulence equal to 15%:

The injection Reynolds number related to the fuel flow is given:

$$\Re_{\text{H}_2} = \frac{\rho_{\text{H}_2} \bar{V}_{\text{H}_2}}{\mu_{\text{H}_2}} r_1 = 8934 \quad (2)$$

Mathematical modelling

In this study, a CFD approach is applied. The prediction of the aerothermochemical variables of fluid-flow is available by solving the RANS equations, energy and transport of

Operating conditions

The studied configuration is a set of two turbulent jets in an axis-symmetric burner, composed of a coaxial injector, (r_1 and r_2 , of length, l , opening on a cylindrical pipe of length, L , and radius, R , fig. 1. An air stream of standard composition (O₂% = 21.008%,

chemical species [20-22]. Turbulence is described by $k-\varepsilon$ model [16-25]. This is useful in order to correct an overestimation due to radial expansion of the round jet coming from the ring injector [26, 27].

Thus, the governing equations include the continuity eq. (3), momentum eq. (4), and additional conservation equations, such as energy eq. (6) and species concentrations eq. (7). In turbulence circumstance, two others equations are added eqs. (10) and (11).

We can write these equations as following [20-28]:

– Continuity equation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (3)$$

– Momentum equations

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \overline{u_i' u_j'}) \quad (4)$$

For combustion cases, all fluids are assumed as Newtonian and the viscous stress tensor:

$$\tau_{ij} = \mu \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\} - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \left\{ \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right\} \quad (5)$$

where μ is the molecular viscosity which depends on the fluid. The Kronecker delta is $\delta = 1$, if $i = j$, 0 otherwise.

– Energy equation

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot [\vec{V}(\rho E + p)] = \nabla \cdot \left[k_{\text{eff}} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\tau_{\text{eff}} \vec{V}) \right] + S_h \quad (6)$$

where k_{eff} is the effective conductivity, J_j – the diffusion flux of species j , and S_h – the combination of heat chemical reactant and every other heat resource which are defined.

– Species equation

$$\frac{\partial(\rho Y_\alpha)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_\alpha)}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_j^\alpha}{\partial x_j} + w_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots, n \quad (7)$$

where n is the number of species, J_j^α – the molecular diffusivity flux of the species α in the j^{th} co-ordinate direction, w_α – the mass reaction rate of this species per unit volume, and Y_α – the mass fraction of species α .

The diffusive flux, J_j^α , can be approximated:

$$J_j^\alpha = -\frac{\mu}{\text{Sc}_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} = -\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \quad (8)$$

where Sc_α is the Schmidt number of the species α , defined:

$$\text{Sc}_\alpha = \frac{\mu}{\rho D_\alpha} \quad (9)$$

where D is the molecular diffusivity of the species α relative to the other species.

Turbulence-combustion modelling

The RANS are used to calculate the transport of the averaged flow quantities, with the entire range of turbulent time and length scales being modeled. The RANS approach greatly reduces the required computational effort and resources compared to LES and DNS. This is why RANS method is widely adopted for practical engineering applications.

In this work, the RNG k - ε turbulence model is used for determining the turbulence behavior which defined by the transport equations [5, 28, 29]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_k \mu_{\text{eff}} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\alpha_\varepsilon \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) + C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \quad (11)$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} = C_\mu \rho \vartheta \varrho \quad (12)$$

$$R_\varepsilon = \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta \eta_0) \varepsilon^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (13)$$

where ϑ the velocity is scale and ϱ – the length scale [30].

All the coefficients of eqs. (10)-(13) are illustrated in tab. 1.

Table 1. Constants values used for turbulence models [29]

	C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$
RNG k - ε	0.0845	1.3900	1.3900	1.4200	1.6800

where $\eta \equiv Sk\varepsilon$, $\eta_0 = 4.38$, and $\beta = 0.012$, [29].

The effective viscosity is given by the next equation:

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t \quad (14)$$

where μ is the eddy-viscosity and μ_t – the turbulence viscosity.

The hydrogen combustion phenomena is modeled by using PDF/equilibrium mixture fraction technic [18, 22, 30]. The PDF combustion model is based on the mixture fraction approach with an assumption of fast chemistry [4, 16]. This, offers some advantages over the EDS or EDS-finite-rate models. In addition, it allows intermediate species prediction, more thorough turbulence-chemistry coupling [6, 15, 30].

In order to determine how the injection conditions influenced the hydrogen flame behavior, this study is divided in two parts; in the first, one air (23% O₂, 79% N₂) is used as oxidizer; the chemical kinetics reactions used is reduced mechanism of twelve steps reactions and nine species. The second one pure O₂ (100% O₂, 0% N₂) with twelve steps reactions and eight species. The two cases are based on Boivin's mechanism [31].

To solve the RANS equation, a turbulence model is used for determining the turbulence behavior in the momentum equations and, a combustion model is used to obtain the time-averaged reaction rate for the both energy and space continuity.

In this work, the turbulence is modeled using the RNG k - ε turbulence model. The hydrogen combination is treated using the PDF-equilibrium mixture fraction model. Also, the heat transfer is treated via the discrete-beam method [22, 30].

Numerical method

In this investigation, we have used the CFD package Ansys FLUENT 12.0 in order to model combustion and heat transfer phenomenon in a diffusion hydrogen-air (or hydrogen-di-oxygen) flame. All the governing equations including momentum, energy, species transport, turbulence and chemical reactions are solved using the finite volume approach coupled to turbulence and PDF models. The velocity and pressure fields are linked via SIMPLEC algorithm. The grid nodes are interpolated via the second-order schemes [22].

The numerical simulations are carried out on 2-D, axis-symmetric, quadrilateral and non-uniform grid-mesh of co-ordinates 14442 cells. The grid spacing decreases far from the reaction zones, the mesh form is illustrated on fig. 2. A grid independence test was performed which it leads to use 14442 cells grid, fig. 3.

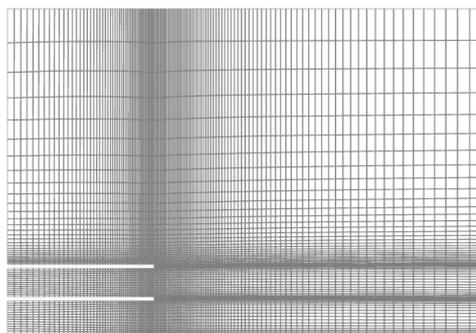


Figure 2. Grid form type used in this study

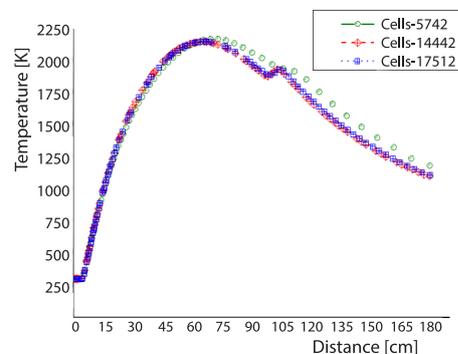


Figure 3. Grid independence test: temperature distribution along the axial direction

The residual of the energy equation should be below 10^{-6} and for all other variables it is set at 10^{-4} to ensure the convergence of the solution. The swirl velocity of components is eliminated in the steady-state CFD study. To investigate various aspects of combustion, the simulation is done in stoichiometric equivalence ratios ($\Phi = 1$).

Second-order discretization scheme is applied to solve all governing equations. The residual of the energy equation should be below 10^{-6} and for all other variables it is set at 10^{-4} to ensure the convergence of the solution. The swirl velocity of components is eliminated in the steady-state CFD study. To investigate various aspects of combustion, the simulation is done in stoichiometric equivalence ratios ($\Phi = 1$).

The instantaneous thermochemical state is described by means of the mixing fraction which represents a single passive scalar when the diffusion coefficients are equal for all chemical species. The mixing fraction is defined [32]:

$$f = \frac{z_i - z_{i,ox}}{z_{i,f} - z_{i,ox}} \quad (15)$$

Results and discussion

Further analysis is conducted on the behavior of the diffusion flame with respect to the composition of the oxidizing current, which we assume to be pure oxygen (100% O_2 , 0% N_2). The analysis involves varying the injection rate of the hydrogen flow and the temperature of the oxygen.

Influence of the air blowing speed

To study the behavior of the temperature in function of different air velocities injection are performed. Hence, the temperature distribution analysis shows that whenever the

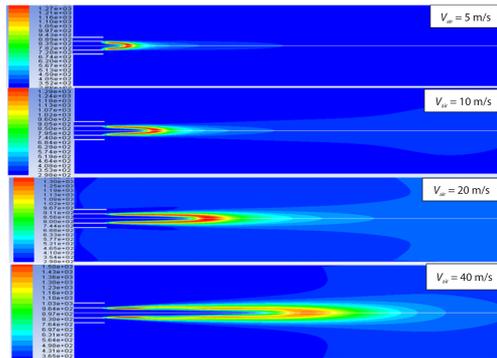


Figure 4. Effect of the air blowing speed on the behavior of the flame

air blowing speed increases, the flame front escapes even more from the injection plane, but the flame no longer takes off from the central injector, fig. 4. It can be seen that the maximum temperature is proportional to the air blowing speed. In this context, a maximum temperature of 1370 K is recorded for $V_{\text{air}} = 5$ m/s. The temperature is rising to 1630K for $V_{\text{air}} = 40$ m/s. This means that the consumption of hydrogen increases, but the maximum temperature shifts backwards, unlike the flame front which escapes forward, forming a kind of flame envelope by enclosing the jet air. This can considerably increase the air-hydrogen contact surface, which promotes better combustion.

Study of the H_2-O_2 flame

We will deal here with the effect of two parameters, namely:

- The hydrogen injection speed.
- The oxygen inlet temperature.

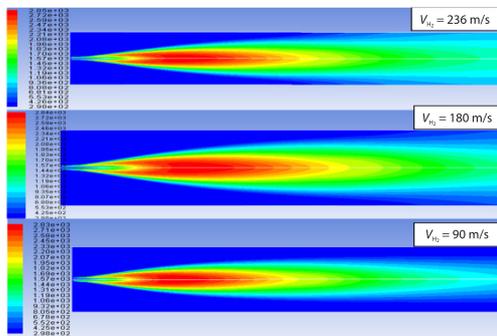


Figure 5. Effect of hydrogen injection speed on the static temperature fields

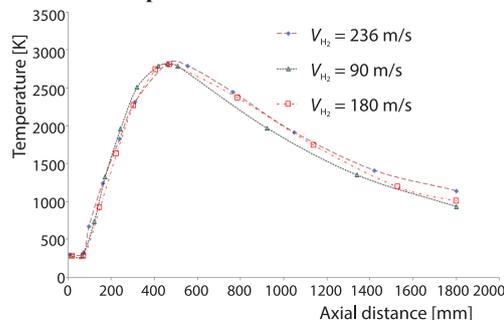


Figure 6. Effect of hydrogen injection speed on the temperature

Effect of hydrogen injection rate

In this case, the rate of introduction of oxygen is 1 m/s and a temperature of 85 K. For hydrogen, the inlet temperature is 287 K, injected at the following respective speeds; 90 m/s, 180 m/s, and 236 m/s. Figure 5 shows that the maximum temperature increases significantly depending on the rate of H_2 injection. For an axial station located at $x = 480$ mm, the maximum values recorded are 2848 K when $V_{H_2} = 236$ m/s and 2839 K for $V_{H_2} = 90$ m/s. Which represents a speed difference about $\Delta V_{H_2} = 146$ m/s. This may indicate that the speed of hydrogen injection does not have a great effect on the value of the maximum temperature to be reach. On the other hand, we can clearly see its influence on the shape of the flame.

Figure 6 illustrates the temperature variations along the direction of the central axis of the combustion chamber. The curve for $V_{H_2} = 236$ m/s is located above that of $V_{H_2} = 90$ m/s, this explains why the flame magnitude for $V_{H_2} = 236$ m/s is slightly large compared to that

of $V_{H_2} = 90$ m/s. The flame core keeps the same shape and illustrates a flame hanging from the nozzle of the injector. The two graphs approximate each other up to $x = 250$ mm which represents a point of intersection.

On the other hand, fig. 7 shows that the slopes of the mass fractions are important, which reveals a rapid disappearance of hydrogen. Indeed, hydrogen has become almost non-existent beyond $x = 600$ mm. We also note that the graph of $V_{H_2} = 90$ m/s is relatively sharp compared to the others, this is explained by the fact that the flame hangs in a place closer to the injectors, than in the case of $V_{H_2} = 236$ m/s where we can note a blowing of the flame which begins to take place.

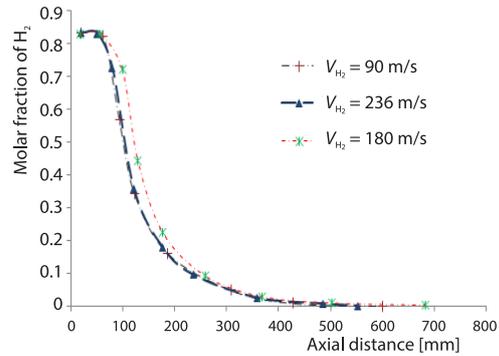


Figure 7. Effect of hydrogen injection speed on the H_2 mass fraction

Effect of oxygen inlet temperature

In this case, the parameters relating to the H_2 flow are maintained ($V_{H_2} = 236$ m/s and $T_{H_2} = 287$ K). The oxygen inlet temperatures are changed as $T_{O_2} = 85$ K, $T_{O_2} = 120$ K, and $T_{O_2} = 300$ K. Figure 8 shows the effect of the oxygen inlet temperature does not seem to be very large on the axial distribution of the static temperature. The visualization of the combustion temperature fields, fig. 9, shows the shapes of the temperatures are the same. However, at the output of the burner, the output temperature for $T_{O_2} = 85$ K is higher than that of $T_{O_2} = 300$ K.

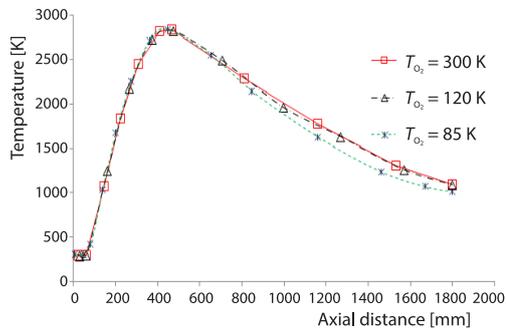


Figure 8. Static temperature distribution on the central axis

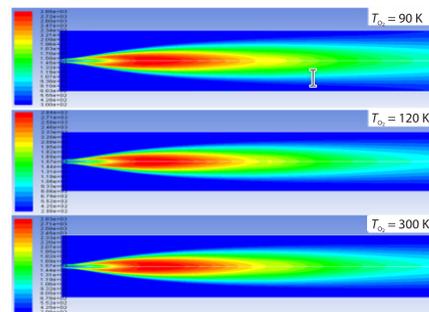


Figure 9. Static temperature fields for different O_2 injection temperatures

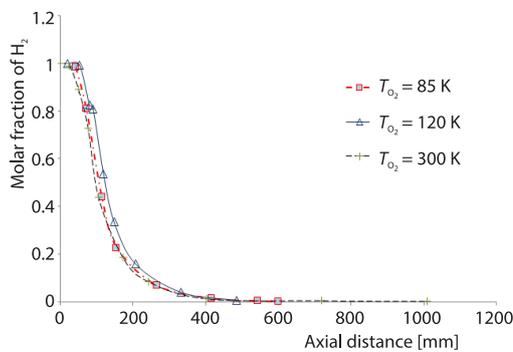


Figure 10. Mass fraction of H_2 for different O_2 inlet temperatures

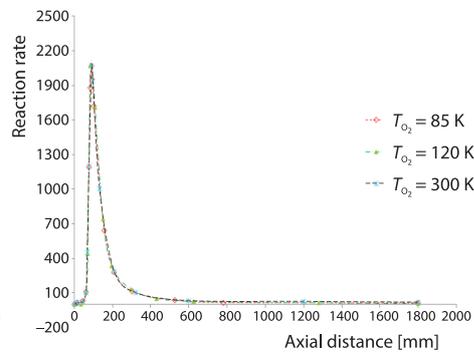


Figure 11. The H_2 reaction rate for different O_2 inlet temperatures

In addition, fig. 10 shows that the slope of hydrogen consumption in the case of combustion with oxygen is greater than the case with air, the oxidation reactions are therefore, faster, although the oxygen injection temperature only slightly influences the consumption of H_2 . This is justified by the variation in the reaction rate plotted as a function of the inlet temperature of the oxygen, fig. 11.

Comparison between hydrogen flames for the case of oxygen and the case of air

In comparison of the case of pure oxygen taken as oxidant (100% O_2 , 0% N_2), fig. 12 shows that the thermal energy released during combustion is greater than for air case. Indeed, the temperature variation on the axis shows the maximum temperature for oxygen (2850 K) is greater than that for air (2130 K) as shown in fig. 13 with a relative rise by 33.80%.

On the other hand, the slope of the plot of oxygen is greater than that of air; which means the reactions in the case of oxygen are faster. This is the reason why the position of the peak of case A is upstream compared to the B case, fig. 13, also, this one requires more time to reach its maximum value, although the maximum temperature for B case is very lower than in A case.

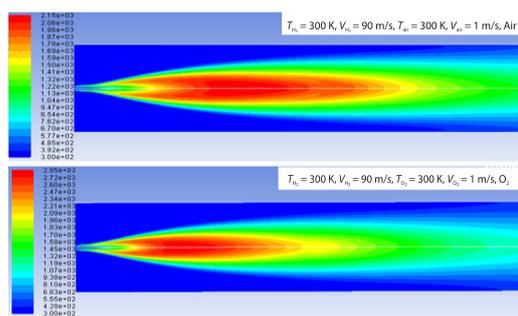


Figure 12. Temperature field for hydrogen combustion difference for air and oxygen case

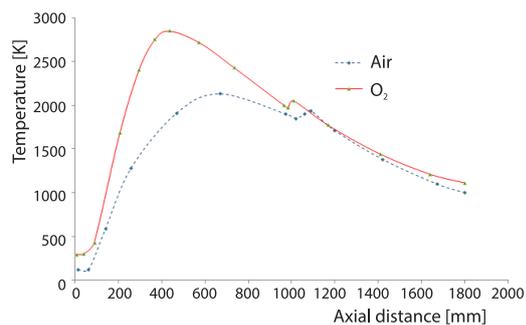


Figure 13. Temperature variation for hydrogen combustion for air and oxygen case

Conclusions

This paper concerns a numerical investigation for the effect of the injection conditions on the structure of the diffusion flame, more specifically, speed and temperature was examined. We are particularly interested in the flame blowing phenomena.

An important remark can be concluded: although nitrogen has an important mass fraction in the air constitutions (78.99% N_2) but hydrogen-air leads to generate non-significant traces of NO_x . On the other hand, it has been observed that increasing the hydrogen injection rate causes the flame to blow away from the injection region, also, the areas with a high temperature gradient are pushed towards the outlet of the combustion chamber away from the injector, which promotes cooling of the nozzle region. The high fuel injection speeds decrease the maximum temperature at the central zone of the tube while they promote an increase in temperatures near the walls of the chamber. The maximum temperature decreases with increasing fuel velocity.

Therefore, the high temperature inlet leads to flame clings to the injection nozzle. Which can represent a dangerous situation by melting the nozzle if the residual time exceeds a certain limit and gives rise to a possibility of flashback if the injection diameter exceeds the

quenching distance of the flame. Also, the flame length decreases when the air inlet temperature and/or the air inlet velocity are increasing so the flame clinging to the injection nozzle. The temperature increases continuously as it advances towards the end of the tube for a low inlet air velocity. That means, for high air speeds, the temperature increases and the length of the flame decreases.

On the other hand, the comparison between the combustion of hydrogen with oxygen with that with air has shown the energy released by the combustion with oxygen is greater for that of the combustion with air. Indeed, by varying the speed of air injection, it has been observed that the flame front moves away from the outlet of the axial injector without leaving it. However, the increasing in the hydrogen injection rate pushes the flame front away from the injection nozzle. The areas of high temperature gradient are pushed out of the tube away from the injector, which helps to cool the nozzle region. The high fuel injection speeds decrease the maximum temperature at the central zone of the tube while promoting an increase in the fuel speed. In addition, it noticed in the two cases previously discussed for combustion with oxygen, the hydrogen appears to be completely consumed upstream of the station $x = 600$ mm.

Nomenclature

$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}$	– constants in k - ε model	V	– overall velocity vector, [ms^{-1}]
D_i	– diffusion coefficient of species i	$V_{\text{air}}, V_{\text{gas}}$	– air, gas velocity, [ms^{-1}]
E, h_i	– enthalpy of species i , [J]	x, y	– radial, axial co-ordinates, [mm]
f	– mixture fraction	Y_M	– fluctuating dilatation in compressible turbulence to the overall dissipation rate
G_k	– generation of turbulence kinetic energy due to mean velocity gradients	Greek symbols	
G_b	– generation of turbulence kinetic energy due to buoyancy	ε	– dissipation rate of turbulent kinetic energy, [m^2s^{-3}]
J_i	– diffusive flux [$\text{molm}^{-2}\text{s}^{-1}$]	μ	– molecular viscosity
k	– turbulence kinetic energy [m^2s^{-2}]	μ_t	– dynamic turbulence viscosity, [$\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$]
n_j	– stoichiometric coefficient for product j	ρ	– mass density
p	– absolute pressure, [Pa]	$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	– turbulent Prandtl number for k and ε , respectively
Re_g	– Reynolds number for gas	\mathcal{G}	– velocity scale
S_k, S_ε	– user-defined source term	$\tilde{\omega}_n, \omega_i$	– density-weighted net rate of production of species n, i [$\text{molm}^3\text{s}^{-1}$]
T	– temperature, [K]		
u_i	– density-weighted cartesian velocity component		

References

- [1] Phebe, A. O., Samuel A. S., A Review of Renewable Energy Sources, Sustainability Issues and Climate Change Mitigation, *Cogent Engineering*, 3 (2016), 1, 1167990
- [2] Koten, H., Hydrogen Effects on the Diesel Engine Performance and Emissions, *International Journal of Hydrogen Energy*, 43 (2018), 22, pp. 10511-10519
- [3] Jose Luis, A., Juan Carlos, B., The Energy Transitionwards Hydrogen Utilization for Green Life and Sustainable Human Development in Patagonia, *International Journal of Hydrogen Energy*, 45 (2020), 47, pp. 25627-25645
- [4] Bakic, V., *et al.*, Technical Analysis of Photovoltaic/Wind Systems with Hydrogen Storage, *Thermal Science*, 16 (2012), 3, pp. 865-875
- [5] Riahi, Z., *et al.*, Numerical Study of Turbulent Normal Diffusion Flame CH₄-air Stabilized by Coaxial Burner, *Thermal Science*, 17 (2013), 4, pp. 1207-1219
- [6] Alrbai, M., *et al.*, Influence of Hydrogen as a Fuel Additive on Combustion and Emissions Characteristics of a Free Piston Engine, *Thermal Science*, 24 (2019), 1, pp. 71-71
- [7] Gupta Ram B., *Hydrogen Fuel: Production, Transport, and Storage*, CRC Press Taylor & Francis Group, Boca Raton, Fla., USA, 2009
- [8] Eichlseder H., *et al.*, The Potential of Hydrogen Internal Combustion Engines in a Future Mobility Scenario, SAE Technical paper, 2003-01-2267, 2003

- [9] Lemmon, E. W., *Thermophysical Properties of fluids*, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 90th ed. CRC Press, Boca Raton, Fla., USA, Section 6: Fluid Properties, 6.21-6.31, 2009
- [10] Law, C. K., *Combustion Physics*, Cambridge University Press, New York, USA, 2006
- [11] Alliche, M., *et al.*, Extinction Conditions of a Premixed Flame in a Channel, *Combustion and Flame*, 157 (2010), 6, pp.1060-1070
- [12] Syred N., *et al.*, Effect of Inlet and Outlet Configurations on Blow-off and Flashback with Premixed Combustion for Methane and a High Hydrogen Content Fuel in a Generic Swirl Burner, *Applied Energy*, 116 (2014), 1, pp. 288-296
- [13] Karagoz, Y., Koten, H., Effect of Different Levels of Hydrogen + LPG Addition on Emissions and Performance of a Compression Ignition Engine, *Journal of Thermal Engineering*, 5 (2019), 2, Special Issue 9, pp. 58-69
- [14] Karagoz Y., Effect of Hydrogen Addition at Different Levels on Emissions and Performance of a Diesel Engine, *Journal of Thermal Engineering*, 4 (2018), 2, Special Issue 7, pp. 1780-1790
- [15] Alliche, M., *et al.*, Effect of Bluff-Body Shape on Stability of Hydrogen-Air Flame in Narrow Channel, in: *Progress in Renewable Hydrogen and other Sustainable Energy Carriers*, (ed. K. Abdallah), Springer Proceedings in Energy, New York, USA, Chapter 30, 2021, pp. 231-238
- [16] Umyshev, D., *et al.*, Experimental Investigation of Distance between v-Gutters on Flame Stabilization and NO_x Emissions, *Thermal Science*, 23 (2019), 5-B, pp. 2971-2981
- [17] Yang, W., Blasiak, W., Numerical Study of Fuel Temperature Influence on Single Gas Jet Combustion in Highly Preheated and Oxygen Deficient Air, *Energy*, 30 (2005), 2, pp. 385-398
- [18] Alliche, M., Chikh, S., Study of Non-Premixed Turbulent Flame of Hydrogen/Air Downstream Co-Current Injector, *International Journal of Hydrogen Energy*, 43 (2018), 6, pp. 3577-3585
- [19] Wang, C. J., *et al.*, Predicting Radiative Characteristics of Hydrogen and Hydrogen/Methane Jet Fires Using FireFOAM, *International Journal of Hydrogen Energy*, 39 (2014), 35, pp. 20560-20569
- [20] Dakka, S., Numerical Analysis of Flame Characteristics and Stability for Conical Nozzle Burner, *Journal of Thermal Engineering*, 5 (2019), 5, pp. 422-445
- [21] Shi, L., *et al.*, A Model of Steam Reforming of Iso-Octane: The Effect of Thermal Boundary Conditions on Hydrogen Production and Reactor Temperature, *International Journal of Hydrogen Energy*, 33 (2008), 17, pp. 4577-4585
- [22] Hua, Jingsong, *et al.*, Numerical Simulation of the Combustion of Hydrogen Air Mixture in Micro-Scaled Chambers – Part II: CFD Analysis for a Micro-Combustor, *Chemical Engineering Science*, 60 (2005), 13, pp. 3507-3515
- [23] ***, FLUENT Ansys, Theory Guide. Ansys Inc., 2009
- [24] Khaladi, F. Z., *et al.*, Numerical Simulation of CH₄-H₂-Air Non-Premixed Flame Stabilized by a Bluff Body, *Energy Procedia*, 139 (2017), Dec., pp. 530-536
- [25] Pope, S. B., The PDF Methods for Turbulent Reactive Flows, *Progress in Energy and Combustion Science*, 11 (1985), 2, pp. 119-192
- [26] Obieglo, A., *et al.*, Comparative Study of Modelling a Hydrogen Non-premixed Turbulent Flame, *Combustion and Flame*, 122 (2000), 1-2, pp. 176-194
- [27] Nanduri, J. R., *et al.*, Assessment of RANS-Based Turbulent Combustion Models for Prediction of Emissions from Lean Premixed Combustion of Methane, *Combustion Science and Technology*, 182 (2010), 7, pp. 794-821
- [28] Bilger, R. W., Turbulent Flows with Non-Premixed Reactants, in: *Turbulent Reacting Flows*, Topics in Applied Physics, (Eds.. Libby P. A., Williams F. A.), Springer, Berlin, Heidelberg, 44 (1980), pp. 65-113
- [29] Yakhot, V., Orszag, S. A., Renormalization Group Analysis of Turbulence, I. Basic Theory, *Journal Sci. Comput.*, 1 (1986), Mar., pp. 3-51
- [30] Raman, V., *et al.*, Eulerian Transported Probability Density Function sub-Filter Model for Large-Eddy Simulations of Turbulent Combustion, *Combustion Theory and Modelling*, 10 (2006), 3, pp. 439-458
- [31] ***, <https://www.cerfacs.fr/cantera/mechanisms/hydro.php#boiv>
- [32] Turns, S. R., *An Introduction Combustion: Concepts and Applications*, 3rd ed., Mc Graw Hill, New York, USA, 2012

-ANNEXE- 2 : Activités scientifiques
(Séminaires & Conférences)



Algerian Symposium on Renewable Energy and Materials
ASREM2022, March 16-17, 2022 Médéa - Algeria



CERTIFICATE OF PARTICIPATION

We hereby certify that

Mohamed BOKHELEF

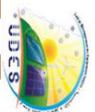
Laboratory of Physic Quantic and Mathematical Modelization of Matter (LPQ3M), University of Mascara, Algeria

Has presented the paper referenced below in Algerian Symposium on Renewable Energy and Materials (ASREM2022), which took place in Médéa, Algeria from 16th to 17 th, March 2022.

Title: Numerical study of a turbulent air hydrogen diffusion flame in an transient regime using

URANS/pPDF Modeling technique

Co-author(s): Mounir ALLICHE, Mohamed SENOUCTI, Habib MEROUANE



L G M D

UBES



CERTIFICATE OF PARTICIPATION

This certificate is awarded to

Mohamed BOUKHELEF

In recognition of participation at the First International Conference on Catalysis Technology for Oil and Gas Industry organized by the *Institut Algérien du Pétrole the 29th & 30th March 2022, in Oran, Algeria* with an outstanding oral presentation entitled:

« **Caractérisation d'un catalyseur pour la production d'hydrogène par le reformage à base des hydrocarbures** »

Co-author(s): Amar ABBOUB



Abdelkader CHENOUNE

Conference Chair

Sonatrach

PARTICIPATION CERTIFICATE

This is to certify that

Mohammed SENOUCI

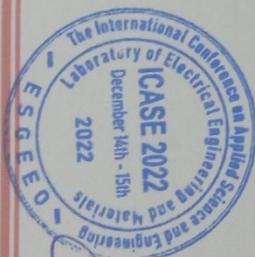
presented a paper, in an oral session, entitled:

«An numerical investigation of effects of chemical kinetic mechanisms on the structure of turbulent jet diffusion H₂/air flame with Lagrangian PDF Method»

Authors: **M. Senouci, A. Bounif, H. Merouane and M. Boukhelef**

at the International Conference on Applied Sciences and Engineering (ICASE 2022)

December 14th - 15th, 2022, Oran, Algeria




Dr. KESSAIRI Khadra
Conference Chairman

ICASE 2022 General Chair



PEOPLE'S DEMOCRATIC REPUBLIC OF ALGERIA
 Ministry of higher education and scientific research
 Hassiba Benbouali University of Chlef
 Faculty of Exact Sciences and Informatics

SSENAM'6

CERTIFICATE OF PARTICIPATION

This is to certify that:

Mohamed BOUKHELEF

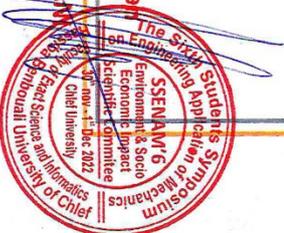
Participated in the sixth student's symposium on engineering application of mechanics,
 "Environment and Socio-Economic impact" (SSENAM'6-2022), with a poster presentation entitled:

Numerical study of methane piloted diffusion flame jet modeling using OpenFOAM solver

Co-Author(s): Habib MEROUANE, Mohammed SNOUCI, Mounir ALLICHE

Chlef, 30th Nov. & 1st Dec. 2022

Chairman:
Pr. Mohammed HADJ MELIANI





CERTIFICATE OF PARTICIPATION

THIS CERTIFICATE IS PROUDLY PRESENTED TO

Mr. Boukhelef Mohamed

Co-authors: *Habib Merouane, Aliche Mounir & Snouci Mohammed*

WHO HAS SUCCESSFULLY PARTICIPATED IN THE
2nd INTERNATIONAL SEMINAR ON INDUSTRIAL ENGINEERING AND APPLIED MATHEMATICS (ISIEAM'22) IN SKIKDA (ALGERIA), OCTOBER 23 & 24th, 2022

TITLE
NUMERICAL STUDY OF UNSTEADY STATE OF NON-PRE-MIXED TURBULENT FLAME BEHAVIOR

Dr. Mohamed Soudaty
Chairman of ISIEAM'22



Dr. Ahmed Belachri
Scientific committee chair





People's Democratic Republic of Algeria
 Ministry of Higher Education and Scientific Research
 University of KHEMIS MILIANA
 Faculty of Sciences and Technology



Chairs of the Conference

Certificate of Attendance

The chairs of the CAPS2023, attest that:

BOUKHELEF Mohamed

Faculte de Technologie, University of Mascara

Attended the national conference "Computational and Applied Physics Symposium 2023" (CAPS2023), held on Wednesday May 10th 2023, at the University of Khemis Miliana (Algeria), with a Poster Communication under track: "Thermal and Energy Physics"; entitled:

"Numerical investigation of free stream air-methane piloted diffusion flame jet modeling using OpenFOAM solver"

With the following co-author(s):

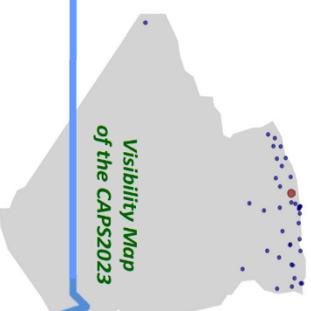
Habib MEROUANE(UMSM); Mohammed SENOUCI(USTO); Mounir ALLICHE(UVFM); Amar ABBOUB(UMSM)

The CAPS2023 is supported by a national scientific committee with 67 members from 21 institutions (Universities and Research Centers). In total, 165 submissions were received, 145 accepted, and 136 confirmed. The CAPS2023 was attended by 115 participants from 38 different institutions, with 119 communications including 2 plenary talks, 24 Oral communications, and 93 Poster communications, divided into eight major tracks. The Attendance rate (effective participation / confirmed participation) was 84.5%.

Computational and Applied Physics Symposium 2023

May 10th, 2023, Khemis-Miliana, Algeria

<https://sites.google.com/univ-dbkcm.dz/caps2023>



Visibility Map of the CAPS2023

Chairman of the CAPS 2023
DR.DJENOUH BENZAHED

Chairman of the CAPS 2023
Organizing Committee
Dr.Salem-Skipha MENTRIDI

Chairman of the CAPS 2023
Scientific Symposium
Dr.Hacime BOBKABCHA





الجمعية الجزائرية لصناعة الغاز
Algerian Gas Industry Association



1993 - 2023

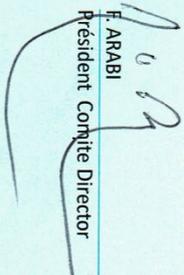
THIS HONORIFIC CERTIFICATE IS DELIVERED TO

Mr. BUKHELEF Mohamed

In recognition for his great implication and contribution, as Speaker
in the Technical and Scientific Sessions during the 7th Symposium of the
Algerian Association of Gas Indu **13th & 14th** of March 2023 in Le
Mérïdien - Oran stry (AIG) held on



Oran
March, 15th 2023


F. ARABI
President Comite Director