

Modélisation d'une flamme de diffusion turbulente

N. Boughattas*, M. H. Gazzah, R. Said

Ecole Nationale d'Ingénieurs de Tunis ENIT, B.P. 37, 1002 Belvédère Tunis, Tunisie.

nejmiddin@yahoo.fr

RESUME

Ce papier porte sur l'étude numérique d'une flamme de diffusion dans une configuration de jet axisymétrique turbulent. Deux modèles de turbulence de premier ordre ($k-\varepsilon$ et MTS) raccordait avec deux modèles du taux de dissipation scalaire (modèle algébrique d'échelles égales et modèle d'échelles non-égales) sont appliqués et confrontés aux résultats expérimentaux de Schefer [1] pour la simulation d'un jet de propane non réactif. Une fois le modèle de turbulence et le modèle de dissipation scalaire sont retenus, le modèle de flamellet raccordait avec la méthode de PDF présumée est appliqué et confronté avec l'expérience de Streb [2] pour la simulation d'une flamme de diffusion de méthane. Les résultats révèlent que le modèle MTS est mieux adapté à la configuration en question pour la prédiction du champ dynamique et scalaire du jet non réactif. On note aussi que la variance de la fraction massique est mieux prédite avec le modèle d'échelles égales. Les résultats montrent enfin, que le modèle de flamellet présente une bonne concordance avec l'expérience. Toutefois, on note un léger désagrément qui est dû à la négligence de la modélisation de la radiation qui est due à la formation des suies.

1. INTRODUCTION

La plus part des foyers de combustions (fours industriels, turbines à gaz...) doivent avoir recours à des systèmes où le combustible et le comburant sont injectés séparément. La combustion non-prémélangée apparaît en effet plus simple à mettre en œuvre et plus sûr. En dépit de ceci, la simulation des flammes de diffusion est d'un grand intérêt pratique dans le but d'améliorer les performances de tel système tant sur le plan économique, que sur le plan environnemental. La modélisation de ce type d'écoulement a fait l'objet de diverses publications au cours des dernières décennies. Malgré le progrès réalisé, beaucoup de questions reste encore à discuter vu la complexité du problème.

Par conséquent, l'objectif de ce papier est de comparer les performances de plusieurs modèles mathématiques (modèle de turbulence, modèle de dissipation scalaire) ainsi que l'application d'un modèle de combustion (modèle flamellet) dans le but d'investir et discuter leurs habilités dans la prédiction d'un jet de propane non réactif (Schefer, [1]) et d'une flamme de diffusion de méthane (Streb, [2]).

Le modèle $k-\varepsilon$ a focalisé l'attention de la plus part des auteurs qui ont travaillé sur ce sujet. Par mis eux, on peut citer Magel et al [3] qui a modélisé une flamme de diffusion turbulente de méthane dans un four cylindrique. De même Sanders [4] a appliqué le modèle $k-\varepsilon$ pour la prédiction de la flamme de Streb [2] et il a préconisé de modifier ces constantes. Concernant le taux de dissipation scalaire, qui représente le paramètre le plus important pour la description de la combustion non prémélangé. Le modèle standard à échelle égale a été abondamment utilisé. Très peut de travaux utilisent un modèle autre que ce dernier. En ce qui concerne la modélisation de la combustion non-prémélangée, outre le modèle standard Eddy Dissipation Model de Magnussen et Hjertagr [5], extensivement utilisé dans les codes de calcul industriels vu sa simplicité, plusieurs autres modèles ont été développés. Parmi eux, on peut citer les plus utilisés qui sont le modèle flamellet de Peters [6], le modèle PDF à équation de transport de Pope [7], et le modèle Conditional Moment Closure (CMC) proposé

indépendamment par Klimenko [8] et Bilger [9]. Cependant, le modèle flamellet est le seul modèle de combustion turbulent qui possède un couplage parfait entre la chimie et le transport moléculaire dans le cas de grand nombre de Damköhler, c'est pour cette raison là qu'il est adopté dans notre étude.

2. MODELE MATHEMATIQUE

Les équations qui régissent un écoulement non réactif sont celles de Navier-Stokes, l'équation de conservation de la fraction massique ainsi que sa variance:

- Equation de continuité:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

- Equation de la quantité de mouvement:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\mu} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j''') \quad (2)$$

- Equation de la fraction massique:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\mu}}{Sc_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j''') \quad (3)$$

- Equation de la variance de la fraction massique:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k'^2)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k'^2)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\mu}}{Sc_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k'^2}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_k'^2 \tilde{u}_j''') - 2 \bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j''' \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} - 2 \bar{\rho} \frac{\bar{\mu}}{Sc_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{Y}_k''}{\partial x_j} \quad (4)$$

La valeur moyenne de la densité est obtenue en utilisant l'équation de partage suivante:

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \frac{\tilde{Y}_k}{\rho_k} + \left(\frac{1 - \tilde{Y}_k}{\rho_{air}} \right) \quad (5)$$

On voit bien l'apparition de nouveaux termes (tenseur de Reynolds, flux de diffusions turbulents et taux de dissipation scalaire) qui ont besoin d'être modélisé.

2.1. Modèle de turbulence de premier ordre

Les modèles de premiers ordres (Boussinesq, [10]) sont basés sur l'hypothèse de transport par gradient et permet d'écrire:

$$\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j''' = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad ; \quad \bar{\rho} \tilde{Y}_k \tilde{u}_j''' = -\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad (6)$$

La question est alors de savoir comment évaluer la nouvelle inconnue μ_t .

- Modèle $k-\varepsilon$ standard

Depuis sa création dans les années 70 (Launder et Spalding, [11]), le modèle $k-\varepsilon$ reste à nos jours le modèle le plus utilisé dans les codes de calcul industriels. La viscosité turbulente est

définie par $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$ et les équations de transport de k et de ε sont données par:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\bar{\mu} + \mu_t}{\sigma_k} \right) \left(\frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \right] + S_k \quad \text{avec} \quad S_k = G - \rho \varepsilon \quad (7)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\bar{\mu} + \mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) \right] + S_\varepsilon \quad \text{avec} \quad S_\varepsilon = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} G - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (8)$$

Les constantes du modèle sont données dans la table 1 et le terme G est définie par:

$$G = \mu_t \left[\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right] \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (9)$$

- **Modèle Multiple-Time-Scale : MTS (Two-scale k - ε model)**

Le modèle MTS a été proposé par Kim et Chen [12] et il considère que le spectre d'énergie turbulente est divisé en deux régions, une région de production de l'énergie cinétique turbulente et une région de dissipation de l'énergie cinétique turbulente. Par conséquent, le modèle MTS utilise quatre équations partielles pour la fermeture de la turbulence afin d'expliquer la production, la cascade et la dissipation de l'énergie cinétique turbulente. L'expression de la viscosité turbulente garde la même forme que celle du modèle k - ε et les équations modélisées de k_p , k_t , ε_p et de ε_t sont les suivantes, sachant que les constantes sont données dans la table 1.

$$\frac{\partial(\bar{\rho} k_t)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j k_t)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu + \mu_t}{\sigma_{k_t}} \right) \left(\frac{\partial k_t}{\partial x_j} \right) \right] + S_{k_t} \quad \text{avec } S_{k_t} = \rho(\varepsilon_p - \varepsilon_t) \quad (10)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} k_p)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j k_p)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu + \mu_t}{\sigma_{k_p}} \right) \left(\frac{\partial k_p}{\partial x_j} \right) \right] + S_{k_p} \quad \text{avec } S_{k_p} = G - \rho \varepsilon_p \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \varepsilon_t)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon_t)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu + \mu_t}{\sigma_{\varepsilon_t}} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_t}{\partial x_j} \right) \right] + S_{\varepsilon_t} \quad \text{avec } S_{\varepsilon_t} = C_{t1} \frac{\rho \varepsilon_p^2}{k_t} + C_{t2} \frac{\rho \varepsilon_p \varepsilon_t}{k_t} - C_{t3} \frac{\rho \varepsilon_t^2}{k_t} \quad (12)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \varepsilon_p)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \varepsilon_p)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu + \mu_t}{\sigma_{\varepsilon_p}} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_p}{\partial x_j} \right) \right] + S_{\varepsilon_p} \quad \text{avec } S_{\varepsilon_p} = C_{p1} \frac{G^2}{\rho k_p} + C_{p2} \frac{G \varepsilon_p}{k_p} - C_{p3} \frac{\rho \varepsilon_p^2}{k_p} \quad (13)$$

Table 1. Constantes des modèles de turbulence

| C_μ | $C_{\varepsilon 1}$ | $C_{\varepsilon 2}$ | σ_k | σ_ε | C_{p1} | C_{p2} | C_{p3} | C_{t1} | C_{t2} | C_{t3} | σ_{kp} | σ_{kt} | $\sigma_{\varepsilon p}$ | $\sigma_{\varepsilon t}$ |
|---------|---------------------|---------------------|------------|----------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------------|---------------|--------------------------|--------------------------|
| 0.09 | 1.44 | 1.92 | 1.0 | 1.3 | 0.21 | 1.24 | 1.84 | 0.29 | 1.28 | 1.66 | 0.75 | 0.75 | 1.15 | 1.15 |

2.2. Modèle de transport d'un scalaire

L'équation de transport des fluctuations d'un scalaire moyennée est donnée par l'équation (4).

Le terme $2\bar{\rho} \frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial \tilde{Y}_k''}{\partial x_j} \frac{\partial \tilde{Y}_k''}{\partial x_j}$ qui représente le taux de dissipation scalaire, est noté $\tilde{\chi}$.

- **Modèle d'échelle égale**

Le modèle algébrique classique du taux de dissipation scalaire est basé sur l'hypothèse de la proportionnalité des échelles caractéristiques temporelles et spatiales du champ dynamique et scalaire, et permet d'écrire:

$$\tilde{\chi} = 2 \frac{\varepsilon}{k} \tilde{Y}_k''^2 \quad (14)$$

- **Modèle d'échelle non-égale**

Pour surmonter la déféctuosité du modèle précédent, Yoshizawa [13] a développé un modèle qui n'assume pas l'égalité des échelles et permet d'écrire:

$$\tilde{\chi} = \phi \tilde{Y}_k''^{2\lambda_1} \varepsilon^{\lambda_2} \quad (15)$$

Avec $\phi = \phi_0 (u_0 D_e)^{-1/2}$, $\phi_0 = 6$, $\lambda_1 = 1$ et $\lambda_2 = 0.5$; sachant que D_e représente le diamètre effective définit par $D_e = S_\rho^{-1/2} D_{buse} = \left(\frac{\rho_k}{\rho_a} \right)^{-1/2} D_{buse}$.

2.3. Modèle de combustion

Le modèle flamellet adapté, repose sur l'hypothèse que le front de flamme turbulent est composé de flamellettes d'épaisseur très petite par rapport à toutes les échelles turbulentes. Cette hypothèse permet d'utiliser les résultats obtenus dans une configuration d'écoulement laminaire. La structure d'une flamellette de diffusion laminaire est contrôlée par le transfert de chaleur et de masse et peut être décrite par des équations de transport monodimensionnel (Peters [6]). Le mécanisme réactionnel utilisé pour modéliser la structure d'une flamellette de diffusion laminaire méthane-air dans l'espace de la fraction de mélange, est le mécanisme détaillé de 53 espèces.

La moyenne de n'importe quel scalaire est calculée en utilisant l'approche de PDF présumé à travers l'équation suivante:

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(Z) \tilde{p}(Z) dZ \quad (16)$$

Sachant que $\phi(Z)$ est déterminé par la résolution des équations instationnaires des flamellettes et la PDF du scalaire inerte $\tilde{p}(Z)$ est calculé en utilisant la fonction Bêta.

3. METHODE NUMERIQUE

La méthode des volumes finis (MVF) à maillage décalé de Patankar [14] est utilisée pour la résolution numérique des équations de transports de l'écoulement turbulent. La formulation est elliptique de type convection-diffusion, utilisant un schéma hybride en espace et le couplage pression-vitesse s'appuie sur l'algorithme SIMPLE. La convergence est détectée pour la valeur de 0.3 %. Les équations de conservation qui décrivent la structure d'une flamellette de diffusion laminaire méthane-air, mono-dimensionnelle et instationnaire sont résolues en utilisant le code de calcul développé par Rogg [15].

4. RESULTATS ET DISCUSSION

Les paramètres utilisés dans les simulations numériques sont les mêmes que dans les travaux expérimentaux de Schefer [1] et de Streb [2], et sont données dans la table 2.

Table 2. Configurations expérimentales

| | Schefer [1] | Streb [2] |
|--------------------------------|------------------|-----------|
| U_0 (m.s ⁻¹) | 69.0 | 69.3 |
| U_{cof} (m.s ⁻¹) | 9.2 | 0.05 |
| D_{buse} (mm) | DI=5.26 ; DE=9.0 | 10 |
| Re | 68000 | 29400 |

La figure 1 présente l'évolution des fractions massiques du carburant, de l'oxydant et de quelques produits de combustion (CO_2 , CO et H_2O) pour une flamellette de diffusion de méthane pour un taux d'étirement égale à $100s^{-1}$. Sur la figure 2, on présente l'évolution axiale de la vitesse longitudinale du propane dans le cas d'un jet non réactif. On note que le modèle MTS est plus conforme aux résultats expérimentaux de Schefer [1]. Les évolutions axiales de la vitesse fluctuante longitudinale et transversale sont tracées sur la figure 3. Les résultats numériques des deux modèles sous-estiment les mesures expérimentales, mais avec un léger avantage pour le modèle MTS. Dans la figure 4, on a représenté l'évolution axiale de la fraction massique du propane, le modèle MTS est plus conforme aux résultats expérimentaux. L'examen de la figure 5 où nous représentons l'évolution axiale de la variance de la fraction massique du propane rendu sans dimension par la fraction massique sur l'axe, nous permet de remarquer que le modèle scalaire à échelle égale raccordait avec le modèle de turbulence MTS fourni les meilleures prédictions. Sur la figure 6, on a représenté l'évolution

radiale de la variance de la fraction massique du propane respectivement pour les section $X/D=15$ et $X/D=30$, on constate le même remarque que la précédente. Une fois le modèle de turbulence (MTS) et le modèle scalaire (à échelle égale) sont retenus, le modèle Flamlet est appliqué pour la simulation d'un jet réactif turbulent de méthane (Streb, [2]). Sur la figure 7, on a représenté la variation axiale de la vitesse moyenne et de l'énergie cinétique turbulente du jet de méthane avec et sans combustion. Les résultats de calcul sont globalement en accord avec l'expérience de Streb [2]. La figure 8 présente le profil axial de la température moyenne et révèle un accord satisfaisant avec l'expérimentale de Streb [2].

5. CONCLUSION

Comme déjà signalé au paravent, nous avons étudié dans ce papier, un écoulement non réactif de propane et un autre réactif de méthane. Pour le premier écoulement, on a appliqué deux modèles de turbulence de premier ordre ($k-\varepsilon$ et MTS) raccordais avec deux modèles de dissipation scalaire (modèle d'échelles égales et non-égales). Pour le deuxième écoulement, on a assimilé la flamme de diffusion turbulente à un ensemble de flammelles de diffusion laminaire, et la combustion a été simulée par une méthode probabiliste. Les confrontations de nos simulations avec les mesures expérimentales prises de la littérature révèlent que le modèle de turbulence MTS raccordait avec le modèle scalaire à échelle égale présente la meilleure concordance avec l'expérience. Concernant l'écoulement réactif du méthane, Malgré le petit désaccord entre calcul et expérience, il y a une bonne reproduction de la réalité par le calcul.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

1. Schefer, R.Z., (2001) 'Data base for turbulent, non-premixed, non-reacting propane-jet flow', Combustion Research Facility, Sandia National Laboratories, Livermore, CA.
2. Streb, H., (1993) *Untersuchungen zum Einfluß des Auftriebs auf die Mischung und Reaktion in turbulenten Freistrahldiffusionsflammen*, thesis, Universität Karlsruhe
3. Magel, H.C., Schnell, U., Hein, K.R.G., (1996) 'Simulation of detailed chemistry in a turbulent combustor flow', 26 Symposium on Comb., The Comb. Institute, pp 67-74.
4. Sanders, J.P.H., (1994) *Scalar transport and flamelet modeling in turbulent jet diffusion flames*, Ph. D. thesis, Eindhoven University of Technology, Netherlands.
5. Magnussen, B.F., Hjertager, B.H., (1977) 'On mathematical models of turbulent combustion', *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 16, pp. 719-729.
6. Peters, N., (1987) 'Laminar flamelet concepts in turbulent combustion', 31 Symposium (International) on Combustion, The Comb. Inst., pp. 1231-1250.
7. Pope, S.B., (1985) 'PDF methods for turbulent reactive flows', *Prog. Energy Comb. Sci.*, Vol. 11, pp. 119-192.
8. Klimenko, A.Y., (1990) 'Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow', *Fluid Dynamics*, Vol. 25, pp. 327-334.
9. Bilger, R.W., (1993) 'Conditional moment closure for turbulent reacting flow', *Phys. Fluids*, A5, pp. 327-334.
10. Boussinesq, J.V. (1877) *Théorie de l'écoulement tourbillonnant*, Mémoire présente par la division savante, Paris.
11. Launder, B.E., Spalding, D.B. (1974) 'The numerical computation of turbulent flows', *Comput. Meths. Appl. Mech. Eng.*, Vol. 3, pp. 269-289.
12. Kim, S.W., Chen, C.P. (1987) 'A MTS turbulence model based on variable partitioning of the turbulent kinetic energy spectrum', *Num. Heat Trf., Part B*, 16, 193
13. Yoshizawa, A., (1988) 'Statistical modeling of passive-scalar diffusion in turbulent shear flows', *Fluid Mech.*, Vol. 195, pp. 541-555.
14. Patankar, S.V., (1980) *Numerical heat transfer and fluid flow*, Series in computational methods in mechanical and thermal sciences, Hemisphere/Mc Graw-Hill, New York.
15. Rogg, B., Wang, W., (1997) *RUN-1DL: The universal laminar flame and flamelet Computer code, user manual.*

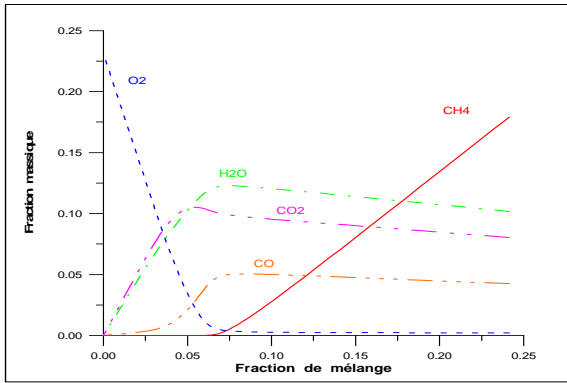


Figure 1 : Fraction massique des espèces d'une flammelette de méthane

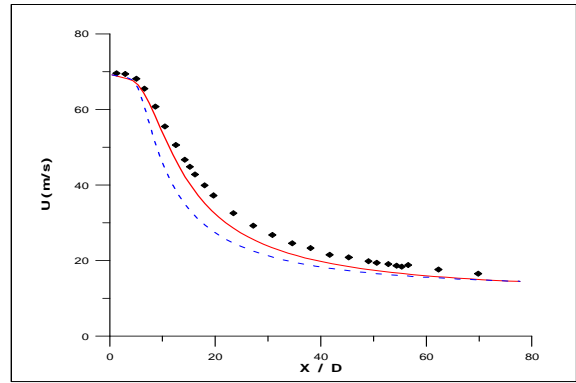


Figure 2 : Variation axiale de la vitesse longitudinale

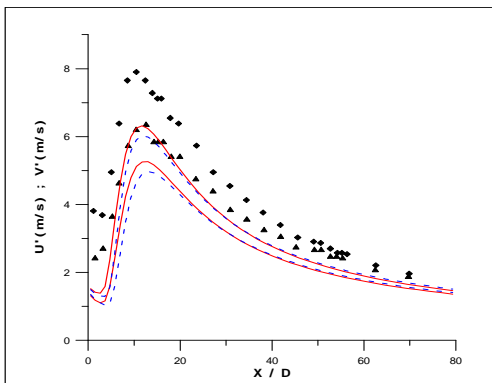


Figure 3 : Variation axiale de la vitesse fluctuante longitudinale et transversale

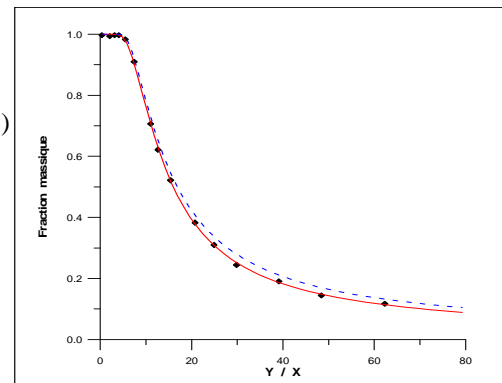


Figure 4 : Variation axiale de la fraction massique

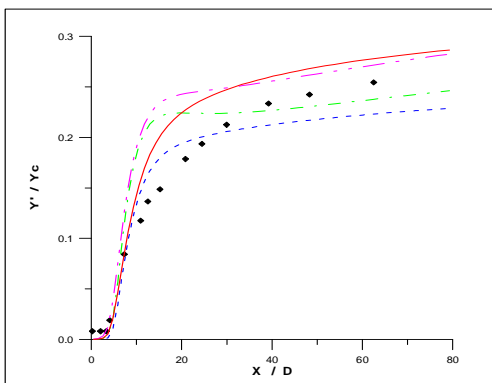


Figure 5 : Variation axiale de la variance de la fraction massique

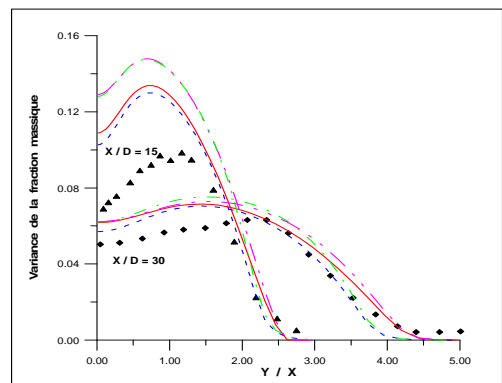


Figure 6 : Variation radiale de la variance de la fraction massique

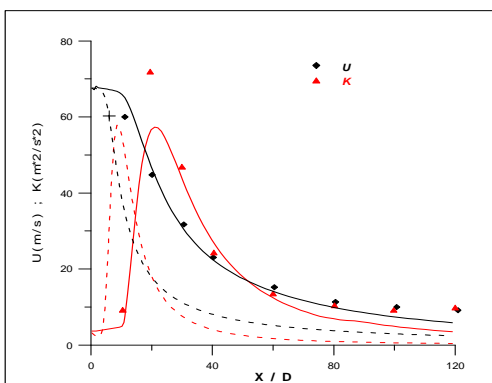


Figure 7 : Variation axiale de la vitesse longitudinale et l'énergie cinétique

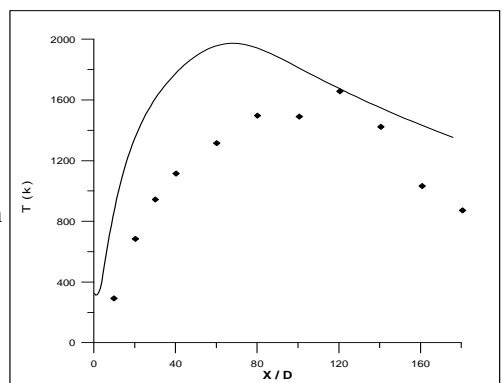


Figure 8 : Variation axiale de la température moyenne