

Simulation instationnaire de la combustion turbulente dans les foyers aérobies et application à la prédiction des émissions polluantes.

Julien SAVRE (DEFA)

Directeur de thèse : Yves d'Angelo (INSA/CORIA)
Encadrants Onera : Nicolas Bertier, Daniel Gaffié (DEFA)

Dans le contexte actuel, où le respect de l'environnement constitue une préoccupation internationale essentielle, la réduction des espèces chimiques polluantes dues à la combustion d'hydrocarbures dans les foyers aéronautiques du secteur civil est devenue, au cours des deux dernières décennies un enjeu majeur pour les motoristes. La prévision par simulation numérique de ces espèces minoritaires (oxydes d'azote, hydrocarbures imbrûlés, monoxyde de carbone, suies, dioxyde de soufre) sur des configurations de type industriel constitue l'axe majeur de mes travaux de thèse.

En pratique, on se retrouve confronté à un problème ardu : la modélisation la plus complète de la combustion des hydrocarbures usuels dans les foyers aérobie implique plusieurs milliers de réactions faisant intervenir plus d'une centaine d'espèces, ce qui est très largement supérieur à ce que peut traiter un code volumes finis tel que CEDRE, compte tenu des moyens de calcul disponibles actuellement. Il s'ensuit que, jusqu'à présent à l'Onera, le calcul des espèces polluantes minoritaires se faisait en post-traitement de calculs RANS, à l'aide d'un solveur dédié nommé PEUL (Probability Eulerian Lagrangian approach).

En ce qui concerne la prise en compte de la chimie complexe, l'avènement des méthodes instationnaires de type LES, pour des raisons de coût de calcul autant que de complexité de mise en œuvre, rend plus délicat le recours au solveur PEUL. C'est la raison pour laquelle nous nous sommes tournés vers une toute autre approche basée sur une tabulation de la chimie [1], [2], dont le principe général, que l'on peut facilement expliquer dans le cadre d'un écoulement laminaire réactif, est le suivant :

- les termes sources chimiques de toutes les espèces ainsi que les fractions massiques des espèces minoritaires sont calculés préalablement par un code spécifique (PREMIX) sur une expérience modèle (flamme de prémélange 1D),
- ces données sont stockées dans une table doublement indexée par le traceur de mélange et une variable d'avancement caractérisant la combustion à la traversée du front de flamme,
- un calcul CEDRE - transportant les espèces majoritaires (avec seulement 6 espèces transportées, on reconstitue plus de 99 % de la masse) à partir desquelles sont reconstruits le traceur de mélange et la variable d'avancement – est ensuite réalisé. La connaissance de ces 2 degrés de liberté permet de faire le lien entre le calcul CEDRE et les états (termes sources et fractions massiques des espèces transportées et minoritaires) stockés dans la table,
- les termes sources lus sont ensuite réinjectés dans les équations de conservation des quelques espèces transportées par CEDRE et les fractions massiques des espèces minoritaires sont interpolées, donnant ainsi accès à un nombre important de données sur la combustion.

Toute la difficulté repose donc sur la définition de la variable d'avancement, qui doit permettre de choisir avec pertinence l'état tabulé à partir des grandeurs calculées par CEDRE, ceci en respectant les différentes contraintes mathématiques (il doit notamment exister une relation biunivoque entre la variable d'avancement et l'abscisse x à travers la flamme).

Plusieurs approches ont été testées en 2007. La figure 1 permet de vérifier la cohérence des résultats obtenus avec CEDRE par rapport à ceux fournis par la table sur une flamme de prémélange 1D. Ce cas canonique - en apparence très simple - est en réalité particulièrement discriminant et les résultats obtenus peuvent être par conséquent jugés très satisfaisants.

Les travaux en cours concernent la prise en compte de l'interaction chimie/turbulence via l'introduction d'une fonction densité de probabilité de forme présumée [3]. Les termes turbulents classiques étant fermés à l'aide d'une approche LES. Le modèle permet la création d'une table « turbulente » dont les paramètres d'entrée sont les deux premiers moments statistiques de la variable d'avancement (cas d'une combustion parfaitement prémélangée). Dans CEDRE, connaissant ces deux données via l'introduction d'une équation de transport supplémentaire pour la variance, il est possible d'interpoler les grandeurs turbulentes liées à la chimie directement dans la table, comme cela a été fait dans le cadre laminaire.

Ce modèle de combustion turbulente reste aujourd'hui à être testé. Dans un premier temps, une configuration académique simple sera étudiée (l'expérience Volvo [4] constituée d'un accroche flamme triangulaire) en 2 puis 3 dimensions (sur 1000000 de mailles). Une fois le modèle validé, l'écoulement turbulent réactif au sein d'une configuration plus complexe (le banc ORACLES [5]) sera simulé. ORACLES a d'ores et déjà été étudié en LES dans un cadre non réactif à l'aide du logiciel CEDRE, les résultats obtenus étant fort encourageants (figure 2).

Références bibliographiques :

- [1] O. Gicquel, N. Darabiha, D. Thévenin, *Laminar premixed hydrogene/air counterflow flame simulations using Flame Prolongation of ILDM with differential diffusion*, Proceedings of the Combustion Institute, 28, 2000
- [2] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, N. Darabiha, *Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation*, Combustion and Flame, 140, 2005
- [3] K.N.C Bray, M. Champion, P.A. Libby, N. Swaminathan, *Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion*, Combustion and Flame, 146, 2006
- [4] A. Sjunesson, P. Hendriksson, C. Lofstrim, *CARS measurments and vizualisation of reacting flows in a bluff body stabilized flame*, AIAA Paper, 92-3650, 1992
- [5] P.D. N'Guyen, *Contribution expérimentale à l'étude des caractéristiques instationnaires des écoulements turbulents réactifs prémélangés stabilisés en aval d'un élargissement brusque symétrique*, Thèse de doctorat de l'université de Poitiers, 2003

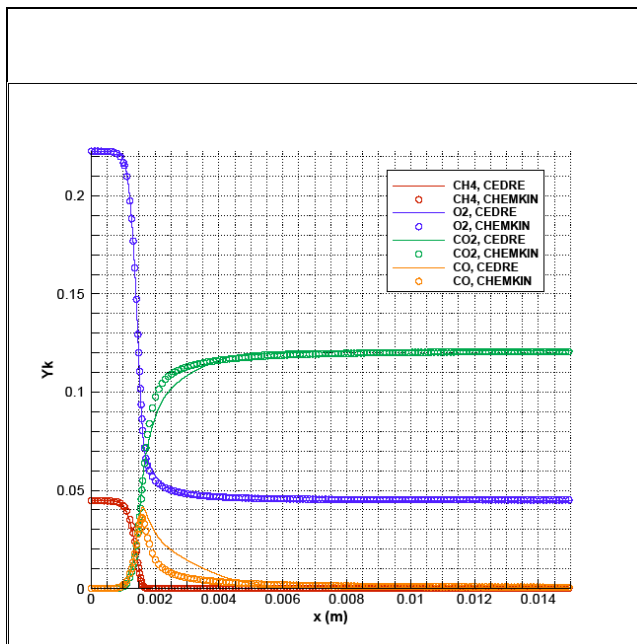


Figure 1 : Profils de fraction massiques à travers une flamme laminaire de prémélange 1D (méthane/air à richesse 0.8 et conditions atmosphériques) obtenus à partir du modèle à chimie tabulée.

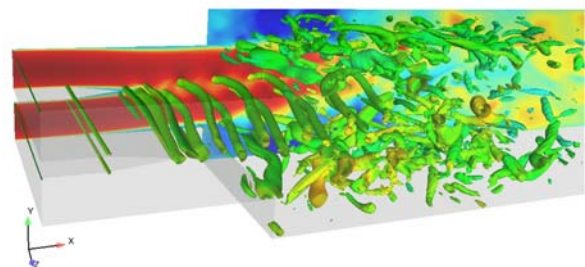


Figure 2 : Iso-surfaces de critère Q permettant de visualiser les tourbillons présent dans l'écoulement turbulent au sein de la configuration ORACLES et contours de vitesse moyenne.