

## Modélisation de la formation des suies et du rayonnement dans les foyers aéronautiques.

Luc-Henry Dorey (DEFA/PRA)

Directeur de thèse : Jean Taine (EM2C/École Centrale Paris)

Encadrants ONERA : Nicolas Bertier (DEFA/PRA)

Lionel Tessé (DEFA/PRS)

Francis Dupoirieux (DEFA)

Les suies sont des particules de carbone solide qui se forment lors de la combustion d'hydrocarbures, en particulier dans les moteurs aéronautiques. Elles sont nocives pour la santé et les normes de plus en plus strictes obligent les industriels à concevoir des moteurs moins polluants. De plus, une part importante du rayonnement dans les chambres de combustion est due aux suies, qui contribuent par ce biais à l'échauffement des parois et à la formation d'oxydes d'azote. L'objectif de cette thèse est d'améliorer la simulation numérique actuelle en prenant en compte ces phénomènes dans le but de prédire les transferts thermiques et les niveaux de polluants dans une chambre de combustion représentative des préoccupations industrielles.

Le mécanisme de formation des suies et les transferts radiatifs sont fortement couplés. Afin de modéliser finement ce couplage, on utilise deux solveurs de la chaîne CEDRE. Le solveur CHARME modélise l'aérothermochimie du mélange gazeux, tandis que le solveur ASTRE calcule avec la méthode de Monte Carlo les transferts radiatifs principalement dus aux espèces  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  et aux suies.

Durant cette première année de thèse, l'ensemble des modèles et la méthodologie ont été mis en place et appliqués au cas simple d'une flamme monodimensionnelle laminaire prémélangée. Dans un premier temps, un modèle de formation des suies a été sélectionné dans la catégorie des modèles semi-empiriques. Ce type de modèle est peu coûteux tout en étant basé sur les phénomènes physiques de formation des suies. Il ne permet pas d'être réellement prédictif mais peut être adapté aux différentes flammes calculées. Le choix s'est porté sur le modèle de Leung et al. [1], qui consiste à résoudre deux équations de transport, l'une pour la fraction massique de particules  $Y_s$  et l'autre pour la densité volumique de particules  $N$ . Ce modèle utilise l'acétylène  $\text{C}_2\text{H}_2$  comme seul précurseur des suies et comme responsable de la croissance en surface des suies [2]. Ce modèle a été implanté dans CHARME afin de calculer  $Y_s$  et  $N$  à partir de l'état chimique du mélange gazeux.

Pour prédire les niveaux de  $\text{C}_2\text{H}_2$ , deux solutions ont été envisagées. La première consiste à utiliser un schéma cinétique comportant les réactions nécessaires à la formation du  $\text{C}_2\text{H}_2$ , et par conséquent un nombre élevé d'espèces chimiques (supérieur à la dizaine). Dans ce cas, la deuxième solution consistant à utiliser la méthode de tabulation FPI développée par Julien Savre [3] apparaît comme moins coûteuse et plus précise. Elle consiste dans un premier temps à tabuler les résultats d'un calcul de flamme 1D laminaire prémélangée réalisé avec une cinétique détaillée (70 espèces et 463 réactions, Qin et al. [4]) en les indexant avec une variable d'avancement  $c$ . Puis lors du calcul CHARME, on résout une équation de transport pour seulement quelques espèces en interpolant leur terme source dans la table. La méthode s'applique à tous types de flammes partiellement prémélangées, dont des foyers aéronautiques industriels.

Afin de valider la cinétique détaillée ainsi que la méthode FPI pour la prédiction du  $\text{C}_2\text{H}_2$ , le calcul d'une flamme 1D laminaire prémélangée a été réalisé avec CEDRE et optimisé (utilisation d'un schéma implicite). L'aérodynamique de la flamme étant une donnée importante pour le modèle de suies, une méthodologie a été mise en place pour appliquer un champ de vitesse initial cohérent avec la chimie. Afin de s'affranchir dans un premier temps du calcul des transferts radiatifs et prendre en compte les pertes de chaleur du dispositif expérimental, on impose à la flamme le profil de température expérimental, par l'intermédiaire d'un terme source dans l'équation de l'énergie.

Le modèle de suies ayant été optimisé par ses concepteurs sur des flammes de diffusion laminaires à contre-courant, il a du être ajusté sur les résultats expérimentaux de la flamme prémélangée

simulée. En effet la physique de formation des suies dans les flammes de diffusion est profondément différente de celle dans les flammes de prémélange. Les figures 1 et 2 confrontent aux résultats expérimentaux les fractions molaires des espèces majoritaires ainsi que la fraction volumique de suies et le diamètre des particules primaires pour une flamme  $C_2H_4$ /air à une richesse de 2,64. Le modèle a ensuite été appliqué à deux richesses supplémentaires pour observer son comportement.

Enfin, le code de transferts radiatifs ASTRE a été intégré à CEDRE afin de réaliser des calculs couplés CHARME-ASTRE pilotés en interne par CEDRE, ce qui simplifie l'utilisation et la mise en place du couplage. Le couplage a donc été appliqué aux flammes précédentes afin de quantifier les transferts radiatifs dans ces flammes simples, souvent négligés dans la littérature.

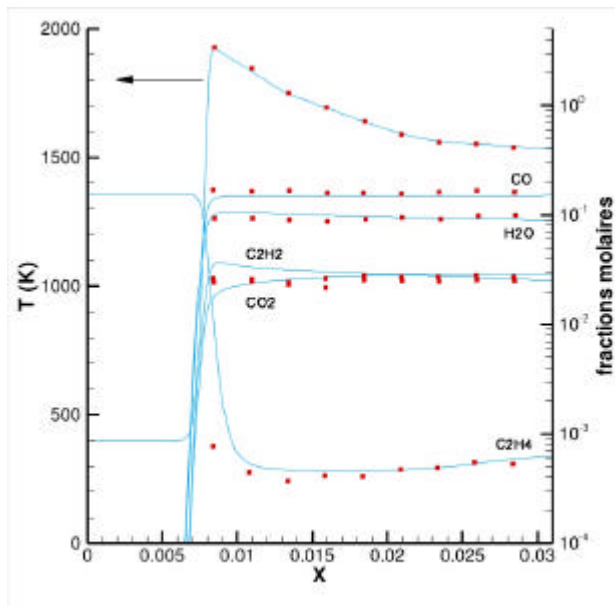


Figure 1: Température et fractions molaires dans la flamme. Symboles: résultats expérimentaux, lignes: calcul CHARME

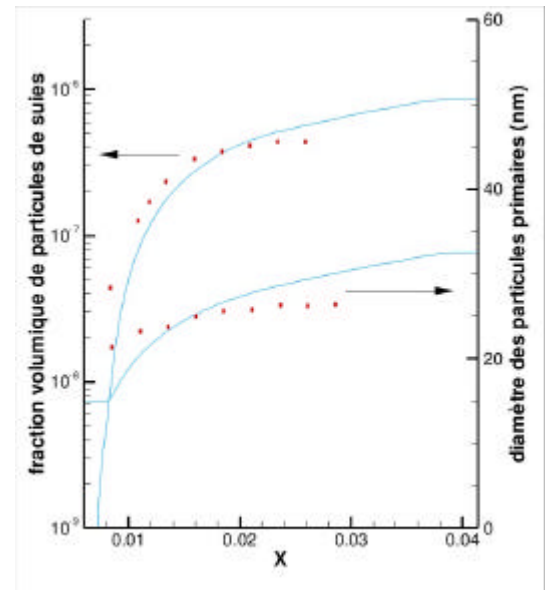


Figure 2: Fraction volumique de suies et diamètre des particules primaires. Symboles: résultats expérimentaux, lignes: calcul CHARME

#### Références bibliographiques :

- [1] K.M. Leung, R.P. Lindstedt, W.P. Jones, *A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames*, Combustion and Flame 87, 1991.
- [2] R.P. Lindstedt, *Simplified soot nucleation and surface growth steps for non-premixed flames*, in: H. Bockhorn (Ed.), *Soot formation in combustion: mechanisms and models*, 1994.
- [3] J. Savre, N. Bertier, Y. D'Angelo, D. Gaffié, *Computations of laminar premixed flames using extended FPI modeling*, Proceedings of the European Combustion Meeting 2009.
- [4] Z. Qin, V.V. Lissianski, H. Yang, W.C. Gardiner, S.G. Davis, H. Wang, *Combustion chemistry of propane: A case study of detailed reaction mechanism optimization*, Symposium (International) on Combustion 28 (2), 2000.