

---

# Quelques aspects de la modélisation numérique appliquée à la combustion turbulente

Luc Vervisch – Julien Réveillon – Laurent Guichard

Département de Mécanique, INSA de Rouen  
LMFN, URA - CNRS 230 / CORIA  
76821 Mont-Saint-Aignan cedex

---

*RÉSUMÉ.* Différents aspects de la modélisation de la combustion turbulente sont présentés. On utilise dans un premier temps la simulation directe afin d'étudier le comportement des flammes triples et le rôle qu'elles peuvent jouer lors d'un allumage dans un milieu qui présente des fluctuations de richesse. Ensuite, le lien entre les approches fonction densité de probabilité et surface de flamme est établi à travers l'introduction d'une fonction densité de surface iso-concentration. Ces développements permettent d'aborder le comportement des surfaces iso-concentration d'une espèce réactive dans un écoulement turbulent à partir de concepts statistiques. Enfin, on présente une nouvelle technique de modélisation de la combustion turbulente basée sur une simulation dynamique-lagrangienne des grandes échelles de la turbulence couplée à l'approche fonction densité de probabilité.

*ABSTRACT.* Various developments in turbulent combustion modelling are presented. First direct numerical simulations are used to study triples flames properties, and the possible role that they play in auto ignition of nonpremixed mixtures. Then, a bridge is built between probability density function and flame surface approaches. In particular, the proposed formalism, which is based on the definition of a surface density function, allows for studying the properties of isoconcentration surfaces from a purely statistical point of view. Finally, a new technique is proposed for the modelling of turbulent combustion. It uses recent developments in the field of dynamic large eddy simulation techniques coupled with probability function approach.

*MOTS-CLÉS :* turbulence, combustion, simulation directe, fonction densité de probabilité, modèle de mélange, fonction densité d'iso-surface, simulation des grandes structures, modèle dynamique lagrangien.

*KEY WORDS :* turbulence, combustion, direct numerical simulation, probability density function, mixing modelling, surface density function, large eddy simulation, lagrangian dynamic modelling.

---

## 1. Introduction

L'expérience, l'outil analytique et la simulation numérique directe sont aujourd'hui utilisés afin d'étudier les phénomènes physiques rencontrés en combustion turbulente. L'ensemble de ces études est bien souvent motivé par la quête des informations indispensables à la réalisation de modèles numériques qui seront ensuite utilisables dans des configurations industrielles.

Dans le cas des flammes turbulentes, la simulation directe, où toutes les échelles du mouvement turbulent sont résolues, offre la possibilité d'étudier en détail les phénomènes résultant du couplage entre les processus réactifs et la turbulence de l'écoulement. Dans un premier temps, nous présentons une étude de la structure des flammes triples réalisée à l'aide de la simulation directe. Cette structure de flamme peut intervenir dans les processus de stabilisation et de propagation des flammes non-prémélangées. En particulier, on met en évidence leur possible contribution à la propagation d'un allumage lors d'une compression (moteur diesel). Ceci nous a conduit à l'étude d'une flamme triple isolée afin de caractériser en détails les conditions de sa propagation.

Les modèles de combustion turbulente sont organisés autour de deux grandes approches. D'une part, les méthodes de type fonction densité de probabilité, où il est supposé implicitement que les réactions chimiques qui participent aux phénomènes de combustion peuvent être isolées des phénomènes diffusifs, et d'autre part, une formulation où il est supposé que les propriétés thermo-diffusives de la zone de réaction sont très proches de celles d'une flamme laminaire légèrement perturbée par la turbulence de l'écoulement. On parle alors de modèles reposant sur une hypothèse de flammelettes. Dans le cas particulier des flammes prémélangées, on présente dans la deuxième partie de cet article le développement d'un formalisme permettant de faire le lien entre l'approche fonction densité de probabilité (pdf) et celle basée sur la notion de surface de flamme utilisée dans le cadre des modèles de flammelettes. Ce travail est motivé par l'observation lors de simulations directes de la nécessité de décrire la structure interne des flammes prémélangées en trois zones. Deux zones situées de part et d'autres du front de flamme, qui sont contrôlées par le mélange turbulent et où les phénomènes diffusifs et réactifs peuvent être découplés, alors que dans la zone d'intense réaction, il est nécessaire de traiter de manière couplée ces phénomènes thermo-diffusifs.

La troisième partie de ce travail est consacrée au développement d'une nouvelle approche couplant la technique de modélisation des grandes échelles de la turbulence (les) avec la méthode de pdf pour les phénomènes de combustion. Cette nouvelle démarche appelée lepdf (large eddy pdf) est présentée. Elle inclut les tous derniers développements en matière de simulation des grandes échelles du mouvement turbulent puisqu'un formalisme dynamique lagrangien y est utilisé. Par le biais de ces propriétés dynamiques, la méthode lepdf assure une modélisation de la combustion turbulente sans imposer la valeur des constantes utilisées dans la modélisation de la turbulence. En effet ces paramètres sont déterminés automatiquement à travers un double filtrage du champ turbulent. On observe en particulier la prise en compte naturelle des effets

induits par le dégagement de chaleur sur la turbulence de l'écoulement.

## 2. Le logiciel *Allegro*

Un code de calcul développé par Guichard *et al* [GUI 95] est utilisé pour l'ensemble des simulations présentées ci-après. Ce logiciel de simulation directe est basé sur une méthode de résolution des équations de la mécanique des fluides compressibles proposée par Poinso et Lele [POI 91] et largement utilisée pour des études en combustion [TRO 94], [RUE 95].

Le schéma numérique de type différences finies possède les propriétés quasi-spectrales indispensables à la simulation directe de la turbulence. Ce schéma est précis au sixième ordre en espace (discrétisation spatiale de type PADE [LEL 91]) et au troisième ordre en temps. Le schéma de Lele propose d'évaluer la dérivée première d'une fonction  $f$  sur un maillage uniforme ( $N$  nœuds séparés par une distance  $\Delta s$  constante), à partir de l'expression suivante:

$$f'_i + \alpha (f'_{i+1} + f'_{i-1}) = \frac{a}{2\Delta s} (f_{i+1} - f_{i-1}) + \frac{b}{4\Delta s} (f_{i+2} - f_{i-2}) \quad ,$$

en introduisant le développement limité en série de Taylor, il vient:

$$f'_i = \sum_{n=0}^{\infty} f_i^{2n+1} \Delta s^{2n} \left( \frac{a + 2^{2n}b}{(2n+1)!} - \frac{2}{(2n)!} \alpha \right) \quad .$$

De l'expression ci-dessus, on peut déduire [LEL 91] la valeur des coefficients  $\alpha$ ,  $a$  et  $b$  qui permettent d'obtenir une approximation précise au sixième ordre de la dérivée pour les points  $i$  tels que  $3 < i < N - 2$ :

$$\alpha = \frac{1}{3}, \quad a = \frac{1}{3}(4 - 2\alpha), \quad b = \frac{1}{3}(4\alpha - 1) \quad .$$

Aux frontières ( $i = 1$ ,  $i = N$ ) la précision est réduite au troisième ordre, aux points  $i = 2$  et  $i = N - 1$ , un schéma au quatrième ordre est retenu qui préserve les propriétés conservatives de la méthode.

La même approche est utilisée pour obtenir une approximation aux différences finies de la dérivée seconde:

$$f''_i + \alpha (f''_{i+1} + f''_{i-1}) = \frac{1}{\Delta s^2} (a(f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) + \frac{b}{4}(f_{i+2} - 2f_i + f_{i-2})) \quad ,$$

ce qui conduit à:

$$f''_i = \sum_{n=1}^{\infty} f_i^{2n} \Delta s^{2n-2} \frac{2}{(2n)!} \left( a + 2^{2n-2}b - \frac{(2n)!}{(2n-2)!} \alpha \right) \quad .$$

Une précision au sixième ordre est obtenue pour:

$$\alpha = 11, \quad a = 13, \quad b = -27, \quad c = 15, \quad d = -1 \quad .$$

Dans le cas d'un maillage non-régulier ( $0 < x < x_{max}$ ), les dérivées sont obtenues par projection du maillage sur un maillage à pas constant ( $0 < s < 1$ ) avec  $\Delta s = 1/(N - 1)$ . Le maillage non-régulier est généré en imposant une position  $x_0$  à partir de laquelle le maillage est étiré, un taux de d'étirement du maillage  $q_r$  et un rapport d'étirement  $q$ . La relation entre les coordonnées  $s$  et  $x$  est donnée ci-dessous:

$$x = \frac{x_{max}}{A(1)}A(s) \quad ,$$

où:

$$A(s) = s - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{q}{q_r} \left( erf(q_r(s + s_0)) - erf(-q_r s_0) \right) \quad ,$$

Le paramètre  $s_0$  est donné par :

$$s_0 = \frac{x_0}{x_{max}}A(1) - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{q}{q_r} erf(-q_r s_0) \quad .$$

Le logiciel *Allegro* est utilisé dans la suite pour la réalisation de simulations bi- et tri- dimensionnelles. Les équations de la mécanique des fluides compressibles sont résolues,  $D/Dt = \partial/\partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla$  est la dérivée particulaire

$$\begin{aligned} \frac{D\rho}{Dt} &= -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \\ \frac{D\mathbf{u}}{Dt} &= \frac{1}{\rho} (-\nabla P + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}))) \\ \frac{DE_t}{Dt} &= \frac{1}{\rho} (-\nabla \cdot \mathbf{q} + \nabla \cdot (\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}) \cdot \mathbf{u}) - \nabla \cdot P\mathbf{u}) \\ \frac{D\varphi_k}{Dt} &= \frac{1}{\rho} \left( \nabla \cdot (\rho D \nabla \varphi_k) + \rho \dot{\omega}_{\varphi_k} \right) \end{aligned}$$

où

- $\rho$  : masse volumique
- $\mathbf{u}$  : vecteur vitesse
- $P$  : pression
- $\mu = \mu_o(T/T_o)^{0.76}$  : viscosité fonction de la température
- $E_T = 0.5\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} + \frac{P}{\gamma - 1}$  : énergie totale
- $\mathbf{q} = -\lambda \nabla T$  : flux de chaleur
- $\lambda$  : conductivité thermique
- $\gamma = 1.4$  : rapport des chaleurs spécifiques
- $Q_F$  : dégagement de chaleur par unité de masse de combustible
- $\varphi_k$  : fraction massique de l'espèce chimique  $k$
- $\dot{\omega}_{\varphi_k}$  : taux de consommation chimique de l'espèce chimique  $k$
- $D$  : coefficient de diffusion

L'indice  $o$  indique un état de référence. La conductivité thermique et le coefficient de diffusion des espèces chimiques sont fonction de la température de façon à garder constant le nombre de Lewis et de Prandtl. De plus la loi des gaz parfaits  $P = \rho RT$  est utilisée pour fermer le système.

Les phénomènes chimiques sont représentés par une réaction du type  $F + O \rightarrow P$ . Le taux de réaction est exprimé sous la forme d'une loi d'Arrhenius

$$\dot{\omega} = \Lambda \rho Y_F \rho Y_O \exp\left(-\frac{\beta(1-\theta)}{1-\alpha(1-\theta)}\right)$$

où le facteur pre-exponentiel  $\Lambda$ , le coefficient de dégagement de chaleur  $\alpha$ , le nombre de Zel'dovich  $\beta$ , et la température réduite  $\theta$  sont définis par

$$\Lambda = K \exp(-\beta/\alpha); \quad \alpha = \frac{T_b - T_o}{T_b}; \quad \beta = \alpha \frac{T_{ac}}{T_b}; \quad \theta = \frac{T - T_o}{T_b - T_o};$$

avec  $T_b$  la température adiabatique de la flamme et  $T_{ac}$  la température d'activation de la réaction chimique.

### 3. Flamme triple et auto-allumage en milieu non-prémélangé

#### 3.1 Introduction

Au sein des systèmes de combustion, où initialement combustible et comburant sont séparés, la structure de la flamme est rarement uniquement caractérisée par des phénomènes relevant des flammes de diffusion. Ceci est particulièrement vrai quand on s'intéresse au déroulement d'un allumage dans un milieu présentant initialement des fluctuations de richesse, ou encore lors de l'étude des mécanismes contrôlant la stabilisation des flammes de diffusion.

Par exemple, dans une couche de mélange constituée de deux écoulements froids de combustible et d'oxydant, les flammes de diffusion peuvent être stabilisées soit par des pertes thermiques au brûleur ou accrochées plus loin dans l'écoulement [LIN 94]. Dans ce dernier cas, la stabilisation de la flamme est assurée dans un milieu partiellement prémélangé par une structure de flamme triple, composée de deux flammes prémélangées (l'une riche et l'autre pauvre en combustible) qui se propagent en amont de l'écoulement et participent à la stabilisation d'une flamme de diffusion (fig. 1).

En opposition avec une flamme prémélangée, une flamme de diffusion ne possède aucun mécanisme de propagation intrinsèque. En effet, dans un milieu prémélangé, le bilan des phénomènes diffusifs et réactifs assure la propagation du front de flamme [CLA 83]. Ce n'est pas le cas en combustion non-prémélangée où la propagation de la combustion et la stabilisation sont contrôlées soit par un mélange intense des réactifs et des produits, qui va transporter de place en place l'énergie nécessaire à la combustion, soit par la propagation de noyaux non prémélangés qui peuvent conduire à l'apparition de flammes triples.

La fig. 2 présente une simulation d'allumage par compression d'un milieu turbulent non-prémélangé. On note ici la présence de flammes triples qui contribuent à la propagation de la combustion le long des lignes stœchiométriques. Suivant le degré de

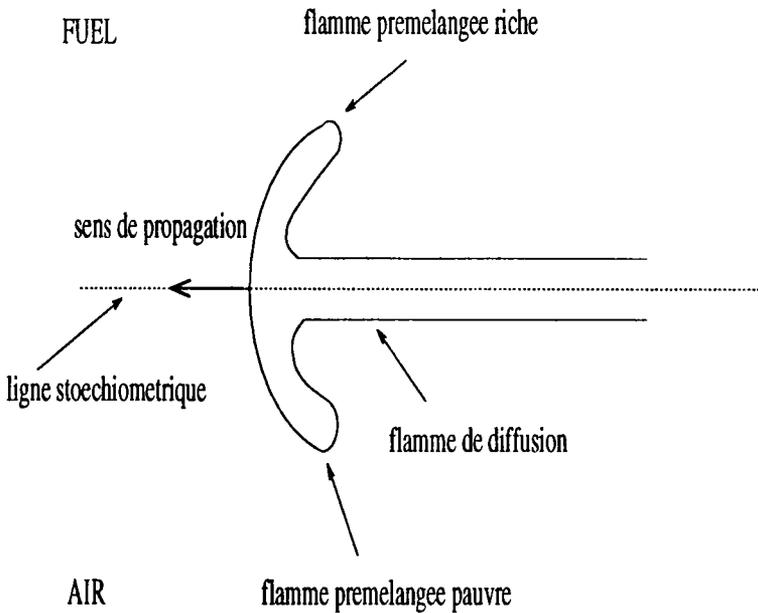


FIG. 1 – Schéma d'une flamme triple le long d'une ligne stœchiométrique.

mélange, c.a.d. la valeur moyenne du gradient de fraction de mélange, à l'instant où les conditions de pression et de température caractéristiques de l'auto-allumage sont atteintes, la combustion pourra se propager dans un régime contrôlé par les flammes triples, où dans un régime de combustion plus proches des flammes de diffusion. La connaissance des propriétés d'une flamme triple isolé est donc un point important.

### 3.2 Flamme triple dans le champ lointain

Dans un premier temps on s'intéresse à une flamme triple stabilisée dans un champ de vitesse uniforme. C'est le cas dans une région suffisamment éloignée du brûleur où le champ de vitesse présente de très faibles gradients. Ceci signifie que la vitesse des gaz frais est égale à la vitesse de propagation de la flamme. Cette vitesse correspond au débit massique nécessaire pour stabiliser la combustion. L'évolution de cette vitesse en fonction des paramètres caractéristiques de l'écoulement et de l'activité chimique est un point important. Les effets induits par le dégagement de chaleur sur la propagation de la flamme laminaire en régime partiellement prémélangé est un aspect essentiel du problème qui est pris en compte ici dans les simulations. Ces simulations s'inscrivent donc dans la suite des travaux analytiques réalisés à densité constante par Dold ([DOL 89]) et aussi des expériences menés par Phillips [PHI 65] ou plus récemment par Kioni *et al* [KIO 93] qui montrent l'existence de ces flammes triples dans des écoulements laminaires et leur rôle crucial dans la stabilisation des flammes de diffusion.

La fraction de mélange  $Z = (1 + Y_F - Y_O)/2$  est définie à partir de la fraction

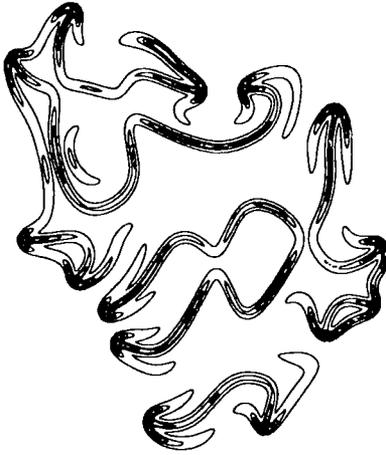


FIG. 2 – Taux de réaction chimique lors d'un allumage par compression d'un milieu turbulent non-prémélangé.

massique de fuel  $Y_F$  et d'oxydant  $Y_O$ . Elle est égale à zéro dans l'oxydant et à l'unité dans le fuel. L'augmentation du gradient de fraction de mélange dans la direction perpendiculaire à l'écoulement conduit à la diminution de la zone partiellement prémélangée où la flamme triple se propage, et donc à une modification des propriétés de propagation de cette flamme.

Sur la fig. 3 est présentée une flamme se propageant dans un écoulement uniforme en vitesse. Les lignes iso-valeur du taux de consommation chimique présentent une structure en flèche: on observe une aile prémélangée riche, une autre pauvre et enfin une flamme de diffusion accrochée le long de la ligne stœchiométrique. On appelle point triple le lieu de rencontre des deux flammes prémélangées et de la flamme de diffusion. Dans cette simulation, la flamme triple est stable dans la mesure où la vitesse des gaz frais est exactement égale à la vitesse de propagation de la flamme.

Le profil de vitesse à travers la flamme triple le long de la ligne stœchiométrique est aussi présenté sur la fig. 3 et comparé au profil de vitesse à la traversée d'une flamme plane stœchiométrique. La vitesse du fluide est normalisée par la vitesse de propagation de cette flamme plane. En plus de l'augmentation de vitesse à la traversée de la flamme, on note que la vitesse de propagation de la flamme triple mesurée loin devant la zone de réaction est supérieure à la vitesse de la flamme prémélangée plane. En revanche la valeur minimale de la vitesse est très proche de celle de la flamme prémélangée (fig. 3). Ces observations s'expliquent par la modification de l'écoulement induite par le dégagement de chaleur. Quand le dégagement de chaleur est pris en

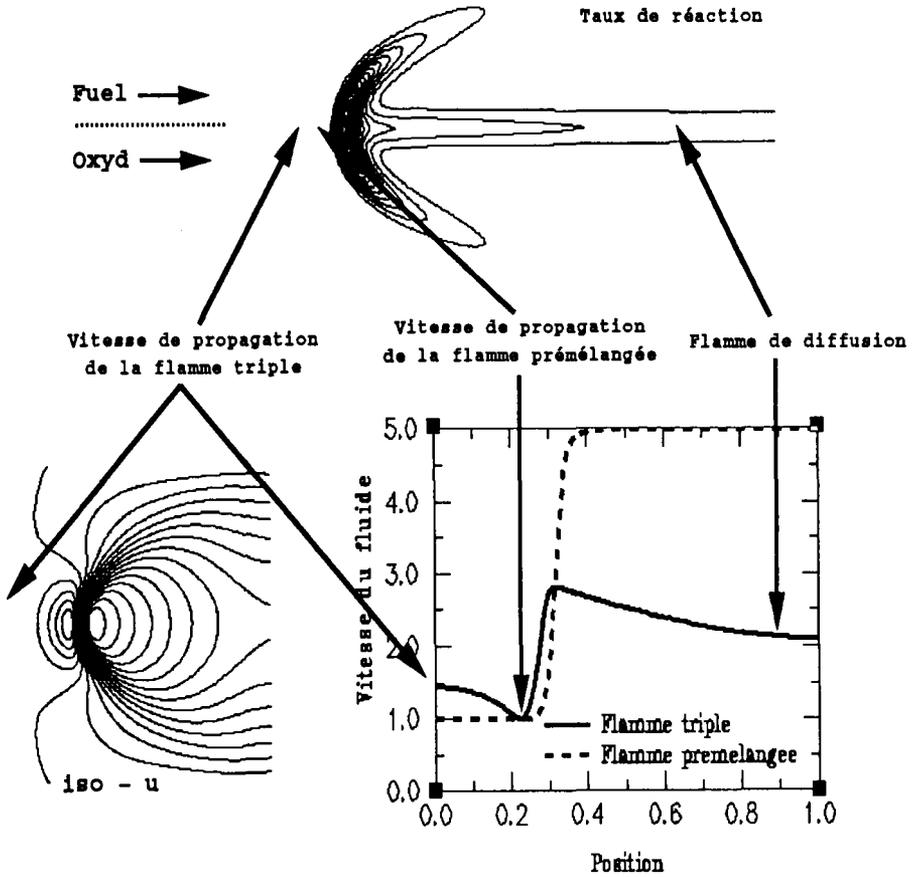


FIG. 3 - Propagation d'une flamme triple, taux de consommation chimique, iso-valeurs et profil sur l'axe de la vitesse longitudinale.

compte, on observe une augmentation de la composante de la vitesse perpendiculaire au front de flamme à la traversée de la zone réactive, tandis que la composante tangentielle n'est pas modifiée. Le saut de la composante perpendiculaire redirige le vecteur vitesse vers la ligne stœchiométrique. Ceci s'accompagne d'une divergence des lignes de courant en amont de la flamme et par conservation de la masse, la vitesse au loin augmente. Les lignes iso-valeurs de la composante longitudinale de la vitesse (fig. 3) présentent une décélération suivit d'une accélération qui s'organise autour du front de flamme courbé.

Ainsi cette étude numérique indique que la stabilisation aura lieu si localement, juste devant la flamme triple, la vitesse des gaz est égale à celle d'une flamme plane prémélangée, ce qui impose une augmentation de la vitesse de l'écoulement loin devant la flamme et par conséquent une augmentation de la vitesse de flamme qui carac-

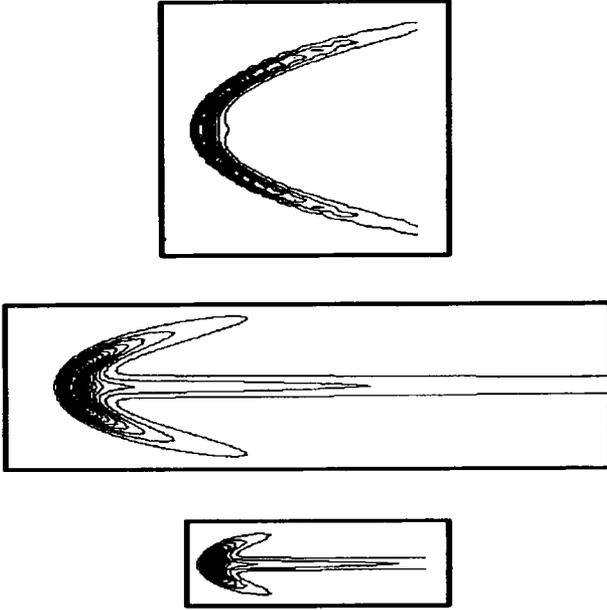


FIG. 4 – Flamme triples pour trois valeurs croissantes (du haut vers le bas) du gradient de fraction de mélange transverse, lignes iso-taux de réaction.

térise le débit massique nécessaire à la stabilisation.

L'augmentation du gradient de fraction de mélange s'accompagne d'une réduction de la déviation de l'écoulement d'où une diminution de la vitesse de flamme. La table 1 présente les valeurs numériques des paramètres utilisés dans les simulations.

Simulation	I	II	III	IV
$\alpha = T_b - T_o/T_b$	0.75	0.75	0.5	0.8
$Re = S_L^o \delta_L^o / \nu_o$	5.4	5.4	3.9	6.1
$\Lambda \delta_L^o \rho_o / S_L^o$	6.880	6.880	1.590	10.670
$\xi_o / \xi_{ref}$	0.9	18.3	25.7	16.4
$\xi_{TF} / \xi_{ref}$	8.3	34.0	35.8	33.4
$S_{FL} / S_L^o$	1.23	1.51	1.17	1.61

Table 1 : Paramètres utilisés pour les simulations de flammes triples dans le champ lointain.  $\alpha$  est la température réduite,  $S_L^o$  la vitesse de la flamme plane stœchiométrique,  $\delta_L^o$  son épaisseur,  $\xi$  l'épaisseur de la zone de mélange. Les indices  $o$  et  $TF$  sont respectivement liés à la position dans le plan d'entrée et à la position du maximum de taux de consommation chimique,  $S_{FL}$  est la vitesse de la flamme triple.  $\beta = 0.8$  pour toutes ces simulations de flammes dont le nombre de Lewis est égale à l'unité.

La fig. 4 présente la structure de la zone de réaction pour trois épaisseurs différentes de la zone de mélange. Le gradient de fraction de mélange et la vitesse de la

flamme triple ne sont pas des paramètres indépendants puisque ce gradient est modifié par la divergence de l'écoulement devant la flamme. Les travaux de Ruestch *et al* [RUE 95] montrent à partir de ces simulations que la vitesse de la flamme triple présente un comportement asymptotique pour de très petites valeurs du gradient de la fraction de mélange. Cette vitesse est alors proportionnelle à celle de la flamme plane pondérée par la racine carrée du rapport des densités à la traversée de la flamme. Il est important de noter que les vitesses obtenues pour ces flammes triples restent de l'ordre de grandeur de celles des flammes prémélangées. La flamme triple se propage environ une fois et demi plus vite que la flamme plane stœchiométrique prémélangée correspondante.

#### 4. Dynamique des surfaces iso-concentration en combustion turbulente

##### 4.1 Introduction

La caractérisation du comportement des surfaces iso-valeurs dans les problèmes de mécanique des fluides est un point important. Ceci est particulièrement le cas en combustion turbulente, puisque les phénomènes diffusifs sont fortement dépendant des propriétés topologiques des surfaces iso-concentrations des espèces réactives. Les études menées à ce jour sur le comportement de ces surfaces ont été essentiellement basées sur des considérations géométriques [CAN 90], [POP 88]. On montre dans la suite qu'il est possible d'utiliser un point de vue purement statistique pour décrire ces surfaces. Cette démarche possède l'avantage de conduire à une équation de transport générique traduisant l'évolution de la surface iso-concentration d'une espèce réactive. De plus, à travers ce formalisme, il est possible d'établir le lien naturel entre les modélisations de la combustion turbulente basées sur le concept de surface de flamme [VEY 94] et celles utilisant les fonctions densité de probabilité [BOR 88]. Enfin, par le biais de la simulation directe le comportement de ces surfaces est examiné en détail dans le cas d'une flamme prémélangée turbulente. Les résultats de cette analyse suggèrent la nécessité de décomposer la structure interne de la flamme prémélangée turbulente en trois zones: deux zones où diffusion et réaction peuvent être découplées entourant une région de l'espace où ces processus physiques sont difficilement dissociables.

##### 4.2 Fonction densité de probabilité (pdf)

Soit  $\overline{P}(\psi; \underline{x}, t)$  la fonction densité de probabilité de la variable aléatoire  $\varphi(\underline{x}, t)$ , avec  $(\min(\varphi(\underline{x}, t)) < \psi < \max(\varphi(\underline{x}, t)))$ . La fonction  $\overline{P}(\psi; \underline{x}, t)$  peut être exprimée à partir de la moyenne d'une distribution de Diract  $\delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))$ .

$$\overline{P}(\psi; \underline{x}, t) = \overline{\delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))} \quad , \quad [1]$$

où  $\delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))$  est défini quand  $\Delta_\psi \rightarrow 0$  par

$$\begin{cases} \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) &= \frac{1}{\Delta_\psi} & \text{si} & \psi - \frac{\Delta_\psi}{2} < \varphi < \psi + \frac{\Delta_\psi}{2} \\ \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) &= 0 & \text{sinon} & . \end{cases}$$

L'Eq. 1 est utile car elle offre la possibilité, quand l'évolution temporelle de la variable aléatoire  $\varphi(\underline{x}, t)$  est connue, par exemple sous la forme

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Omega_{\varphi}(\underline{x}, t) \quad ,$$

d'obtenir l'équation de transport pour la fonction  $\overline{P}(\psi; \underline{x}, t)$ . En effet on a

$$\nabla_{\xi} \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) = - \frac{\partial \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))}{\partial \psi} \nabla_{\xi} \varphi(\underline{x}, t) \quad , \quad [2]$$

avec  $\xi$  qui peut être une coordonnée temporelle ou spatiale. Ceci conduit à

$$\frac{\partial \overline{P}(\psi; \underline{x}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ \left( \overline{\frac{\partial \varphi(\underline{x}, t)}{\partial t} \mid \varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right) \overline{P}(\psi; \underline{x}, t) \right] \quad . \quad [3]$$

Ainsi l'évolution temporelle de la pdf est contrôlée par un flux dans l'espace probabiliste, flux caractérisé par une vitesse égale à la moyenne conditionnée de l'évolution temporelle de la variable aléatoire. L'Eq. 3 indique simplement que si, pour la valeur  $\varphi = \psi$ , la moyenne de  $\partial \varphi(\underline{x}, t) / \partial t$  est non-nulle alors la probabilité de rencontrer l'évènement  $\varphi = \psi$  va être modifiée. Dans la mesure où la probabilité de rencontrer l'ensemble des valeurs possibles est égale à l'unité, une diminution (ou une augmentation) de la densité de probabilité pour  $\varphi = \psi$  implique une modification de cette densité pour d'autres valeurs de  $\varphi$ , d'où le terme convectif. Ce terme assure le transport de la densité de probabilité d'un point à un autre de l'espace probabiliste en fonction de l'évolution de la variable aléatoire.

L'intérêt de l'application de ce formalisme à la combustion turbulente réside dans le fait que la moyenne conditionnée d'un terme source local présente une forme fermée puisque [BOR 88]

$$\left( \overline{\dot{\omega}_{\varphi} \mid \varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right) = \dot{\omega}_{\psi} \quad ,$$

on pourra donc en utilisant le formalisme pdf introduire des modélisations très détaillées pour représenter l'activité chimique.

La structure d'une flamme prémélangée peut être caractérisée par la variable d'avancement de la réaction chimique  $\varphi(\underline{x}, t)$ , égale à l'unité dans les gaz brûlés et prenant la valeur zéro dans les gaz frais. Cette grandeur est contrôlée à chaque instant dans l'écoulement turbulent par l'équation de transport suivante pour laquelle les notations définies ci-dessus sont utilisées

$$\frac{D\varphi(\underline{x}, t)}{Dt} = \Omega_{\varphi}(\underline{x}, t) = \frac{1}{\rho} \left( \nabla \cdot (\rho D \nabla \varphi(\underline{x}, t)) + \rho \dot{\omega}_{\varphi} \right) \quad , \quad [4]$$

D'après l'Eq. 3 on a

$$\frac{\partial \overline{P}(\psi; \underline{x}, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ \left( \overline{-\mathbf{u} \cdot \nabla \varphi(\underline{x}, t) + \Omega_{\varphi}(\underline{x}, t) \mid \varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right) \overline{P}(\psi; \underline{x}, t) \right] \quad . \quad [5]$$

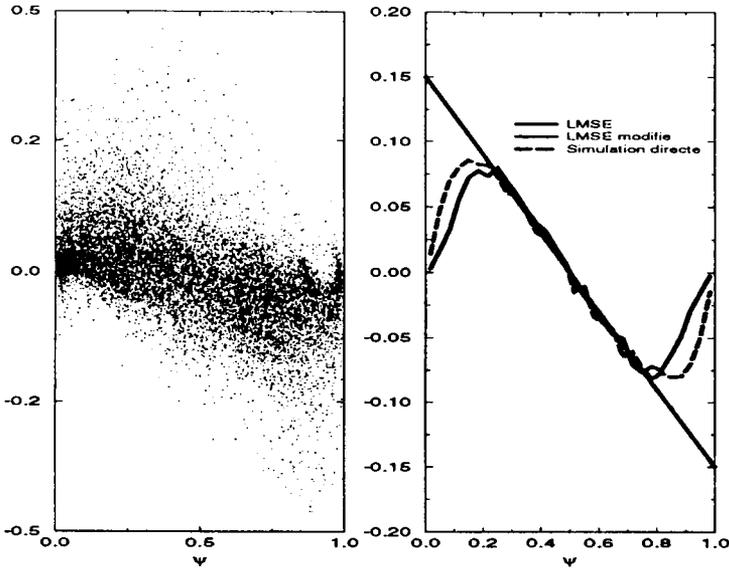


FIG. 5 – A gauche: réponse de  $\Gamma(\varphi) = \nabla^2 \varphi$  dans une couche de mélange, voir fig. 6. A droite: comparaison entre les modèles LMSE (IEM), LMSE (IEM) modifié et la simulation directe.

Ici, les flux dans l'espace probabiliste s'expriment en fonction des effets convectifs, diffusifs et chimiques. Ces flux caractérisent la structure interne de la flamme. Des modélisations doivent être développées pour les termes convectifs et diffusifs relevant d'information en deux points. Si l'activité chimique est directement prise en compte par la description des flammes turbulentes à travers la pdf  $\bar{P}(\psi; \underline{x}, t)$ , l'estimation du terme diffusif  $\left( \frac{1}{\rho} (\nabla (\rho D \nabla \varphi)) \Big|_{\varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right)$  reste un problème ouvert. La dérivée  $\partial/\partial\psi$  de ce terme dans l'espace probabiliste est parfois appelée terme de mélange. Pour des régime de combustion où la diffusion est plus contrôlée par les mouvement convectifs turbulents que par les gradients de concentration imposés par l'activité chimique, des modèles de mélange dont la validité a été prouvée ont été proposés et utilisés dans des configurations de brûleurs non-prémélangés [BOR 91]. L'utilisation d'une réponse linéaire pour  $\left( \frac{1}{\rho} (\nabla (\rho D \nabla \varphi)) \Big|_{\varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right)$  s'annulant pour la valeur moyenne  $\psi = \bar{\varphi}$  est aujourd'hui la forme la plus utilisée (Modèle IEM ou LMSE, [DOP 94]).

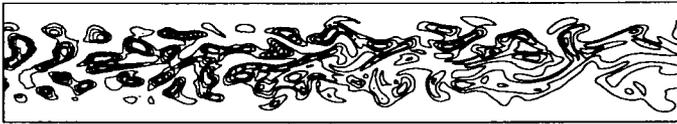
$$\left( \frac{1}{\rho} (\nabla (\rho D \nabla \varphi)) \Big|_{\varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right) = \frac{\bar{\varphi} - \psi}{\tau} ,$$

avec  $\tau$  un temps caractéristique du mélange turbulent.

Le choix de cette réponse linéaire est à peu près justifié dans la région proche de la moyenne  $\psi = \bar{\varphi}$ , mais est difficilement acceptable sur les limites du domaine  $\psi = 0$  et  $\psi = 1$  où la contribution de la diffusion doit s'annuler (fig. 5). Les moyennes

## Spatially Evolving Compressible Turbulence

## Inert Scalar Injection



Blobs Injection



Laminar Injection

FIG. 6 – Iso-concentration d'un composé inerte dans une turbulence de grille, pour deux types d'injection.

conditionnées tracées sur la fig. 5 sont extraites des simulations présentées sur les fig. 6. Ces simulations directes, réalisées avec le logiciel *Allegro* correspondent à la situation physique d'un écoulement turbulent obtenu par passage du fluide à travers une grille. La modification de la taille des injecteurs utilisée pour le composé chimique permet d'étudier le comportement de la diffusion aux petites échelles dans différentes configurations.

#### 4.3 Modèle LMSE (IEM) modifié

Nous proposons ici une modification du modèle LMSE (IEM) afin de prendre en compte le comportement du mélange aux petites échelles pour les limites  $\psi = 0$  et  $\psi = 1$ . La forme de la fonction  $F(\psi) = \left( \frac{1}{\rho} \nabla(\rho D \nabla \varphi) \Big|_{\varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right)$  résulte des interactions multiples entre les structures tourbillonnaires et les zones de mélange à la traversée desquelles  $\varphi$  varie, par exemple, de zéro à l'unité. La résolution de l'Eq. 5 fait appel à des méthodes de Monte Carlo [POP 91] où la pdf est représentée par un ensemble de particules discrètes.

Lors de l'interaction entre un tourbillon et une couche diffusive laminaire, en fonction de la taille du tourbillon et de sa vitesse de rotation, la forme de  $\Gamma(\varphi) = \nabla^2 \varphi$  pour des coupes dans la direction transverse à la zone de mélange, va plus ou moins s'éloigner de la réponse laminaire. A partir de ces observations il est possible de construire un modèle de mélange où chaque particule, utilisée dans la simulation de Monte Carlo, peut être associée à une déformation de la zone de mélange induite par les structures tourbillonnaires. Pour chaque particule de concentration  $\varphi^{(k)}$ , on suppose que la réponse linéaire  $\bar{\varphi} - \psi/\tau$  est une bonne approximation autour de la moyenne. Ensuite, si  $\varphi^{(k)} \leq \bar{\varphi}$  (resp.  $\varphi^{(k)} > \bar{\varphi}$ ) on tire aléatoirement la position  $\psi_0$  (resp.  $\psi_1$ ) où, pour la particule ( $k$ ), la couche diffusive quitte la réponse linéaire  $\bar{\varphi} - \psi/\tau$ . Un raccordement par spline cubique est réalisé pour calculer  $F(\psi = \varphi^{(k)})$  entre  $F(0) = 0$  (resp.  $F(1) = 0$ ) et  $F(\psi_0) = \bar{\varphi} - \psi_0/\tau$  (resp.  $F(\psi_1) = \bar{\varphi} - \psi_1/\tau$ ). La fig. 5 présente des comparaisons entre la simulation directe et la modélisation, les résultats sont encourageants. Ce modèle peut être vue de la façon suivante: le choix des position  $\psi_0$  et  $\psi_1$ , où  $F(\psi)$  quitte la réponse linéaire pour vérifier les conditions aux limites  $F(0) = F(1) = 0$ , permet de simuler l'interaction des zones de mélanges avec un spectre d'échelles. La réponse linéaire  $F(\psi) = \bar{\varphi} - \psi/\tau$  autour de la moyenne apporte une indication sur l'amplitude locale du mélange.

On note que le problème de la modélisation du mélange est double, il faut construire une expression fermée et ensuite estimer un temps caractéristique ; des techniques ont été développées afin de traiter simultanément les deux aspects du problème [FOX 94]. Dans le cas des flammes prémélangées un fort couplage existe entre les effets diffusifs et réactifs, donc l'utilisation de modèles de mélange développés pour des écoulements inertes est parfois discutable.

#### 4.4 Fonction densité d'iso surface (sdf)

En parallèle à la méthode de pdf, une approche basée sur le concept de flammelette associé à celui de surface de flamme a été développée. Dans ce cas une relation très forte est imposée entre diffusion et réaction de sorte que  $\Omega_\varphi(\underline{x}, t)$  (Eq. 4) présente une forme proche de celle rencontrée dans une flamme laminaire. Le lien entre ces deux approches est exposé ci-après par le biais de la notion de fonction densité d'iso surface (sdf) [VER 95a].

Nous allons dans un premier temps introduire la notion de sdf puis établir son équation de transport. Il sera alors possible de mettre en évidence le fait que les modèles basés sur la notion de surface de flamme (par exemple le modèle de flamme cohérente, cfm [CAN 90]) doivent, pour assurer la modélisation, surmonter des obstacles similaires à ceux rencontrés avec les méthodes de type pdf.

La fonction densité d'iso surface  $\bar{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t)$  est définie telle que son intégrale sur un volume  $V$  de fluide est égale, en moyenne, à la densité volumique de l'aire de la surface iso-concentration  $\varphi = \psi$ . Donc si  $\mathcal{A}_\psi$  est l'aire de l'iso-concentration  $\varphi = \psi$ , on a

$$\mathcal{A}_\psi = \int_V \bar{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t) dv \quad . \quad [6]$$

Pour le volume  $V$  de fluide, l'intégrale d'une fonction positive  $f(\underline{x}, t)$ , pondérée par la norme du gradient  $|\nabla\varphi(\underline{x}, t)|$  d'un champ scalaire  $\varphi(\underline{x}, t)$ , est égale à la somme sur toutes les iso-surfaces des intégrales de surfaces de la fonction  $f(\underline{x}, t)$  [KOL 94], c.a.d.

$$\int_V f(\underline{x}, t) |\nabla\varphi(\underline{x}, t)| dv = \int_0^1 d\psi \int_{A_\varphi(\psi)} f(\underline{x}, t) dA(\underline{x}) \quad .$$

Maintenant si  $f(\underline{x}, t)$  est égale à la fonction  $\delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))$  définie précédemment par l'Eq. 1, on a

$$\begin{aligned} \int_V \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) |\nabla\varphi(\underline{x}, t)| dv &= \int_0^1 d\psi \int_{A_\varphi(\psi)} \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) dA(\underline{x}) \\ &= \int_{A_\varphi(\psi)} dA(\underline{x}) = A_\psi \quad . \end{aligned}$$

Des deux équations qui précèdent, on déduit que la quantité

$$\Sigma(\psi; \underline{x}, t) = |\nabla\varphi(\underline{x}, t)| \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) \quad , \quad [7]$$

est une mesure du rapport  $\delta A_\psi / \delta V$  quand  $\delta V \rightarrow 0$ .

En introduisant la pdf  $\overline{P}(\psi; \underline{x}, t)$  on retrouve une formulation proposée par Pope [POP 91] pour exprimer  $\overline{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t)$  en fonction de la pdf  $\overline{P}(\psi; \underline{x}, t)$

$$\overline{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t) = \overline{|\nabla\varphi(\underline{x}, t)| \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))} = \left( \overline{|\nabla\varphi(\underline{x}, t)|} \Big|_{\varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right) \overline{P}(\psi; \underline{x}, t) \quad . \quad [8]$$

Il est maintenant possible d'écrire une équation de transport pour  $\overline{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t)$  en suivant une procédure similaire à celle utilisée pour l'équation pour  $\overline{P}(\psi; \underline{x}, t)$ . En effet si  $\mathbf{n} = -\nabla\varphi(\underline{x}, t) / |\nabla\varphi(\underline{x}, t)|$  est le vecteur normal à l'iso-surface, on a

$$\begin{aligned} \frac{D\delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t))}{Dt} &= -\frac{\partial}{\partial\psi} \left( \Omega_\varphi(\underline{x}, t) \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) \right) \quad , \\ \frac{D|\nabla\varphi(\underline{x}, t)|}{Dt} &= -|\nabla\varphi(\underline{x}, t)| \mathbf{nn} : \nabla\mathbf{u} - \mathbf{n} \cdot \nabla\Omega_\varphi(\underline{x}, t) \quad . \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} \frac{D\Sigma(\psi; \underline{x}, t)}{Dt} &= (-\mathbf{nn} : \nabla\mathbf{u}) \Sigma(\psi; \underline{x}, t) - \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) (\mathbf{n} \cdot \nabla\Omega_\varphi(\underline{x}, t)) \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial\psi} \left( \Omega_\varphi(\underline{x}, t) \Sigma(\psi; \underline{x}, t) \right) \quad . \end{aligned}$$

L'utilisation conjointe de l'opérateur de moyenne avec des moyennes conditionnées sur les surfaces iso-concentrations  $\left(\overline{\Omega_\varphi(\underline{x}, t) | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}}\right)$  définies par

$$\left(\overline{\Omega_\varphi(\underline{x}, t) | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}}\right) = \frac{\overline{\Omega_\varphi(\underline{x}, t) \Sigma(\psi; \underline{x}, t)}}{\overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)}} = \frac{\left(\overline{\Omega_\varphi(\underline{x}, t) |\nabla\varphi(\underline{x}, t)| | \varphi(\underline{x}, t) = \psi}\right)}{\left(\overline{|\nabla\varphi(\underline{x}, t)| | \varphi(\underline{x}, t) = \psi}\right)},$$

conduit finalement à

$$\frac{D\overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)}}{Dt} = \left(\overline{\theta_s | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}}\right) \overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial\psi} \left[ \left(\overline{\Omega_\varphi(\underline{x}, t) | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}}\right) \overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)} \right]. \tag{9}$$

Avec  $\theta_s$ , le taux génération de surface par unité de volume

$$\theta_s = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla\mathbf{u} - \frac{1}{|\nabla\varphi(\underline{x}, t)|} \mathbf{n} \cdot \nabla\Omega_\varphi(\underline{x}, t).$$

Il est important de noter que dans l'Eq. 9 un terme de convection par le champ turbulent est présent dans la dérivée particulière. Si ce dernier est introduit dans l'équation de la pdf, on a, d'après l'Eq. 5

$$\frac{D\overline{P(\psi; \underline{x}, t)}}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial\psi} \left[ \left(\overline{\Omega_\varphi(\underline{x}, t) | \varphi(\underline{x}, t) = \psi}\right) \overline{P(\psi; \underline{x}, t)} \right]. \tag{10}$$

La comparaison de l'Eq. 9 avec l'Eq. 10 montre que sdf et pdf sont transportées dans l'espace  $\psi$  par la moyenne, surfacique ou conditionnée, de la même quantité:  $\Omega_\varphi(\underline{x}, t)$ , le bilan entre diffusion et réaction chimique. Parce que  $\overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)}$  n'est pas une quantité normalisée, un terme source supplémentaire  $\left(\overline{\theta_s | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}}\right)$  apparait dans l'Eq. 9. Il est caractéristique de la production ou de la destruction de surface iso-concentration par unité de volume, le terme de flux  $\partial/\partial\psi$  quant à lui représente le transfert de surface d'une iso vers une autre par diffusion ou réaction chimique.

$\mathbf{u}_{A_\varphi}$  étant la vitesse absolu de l'iso-concentration  $\varphi = \psi$  on définit la vitesse relative de cette surface par

$$S_\varphi(\underline{x}, t)\mathbf{n} = \mathbf{u}_{A_\varphi} - \mathbf{u}$$

et  $\partial\varphi/\partial t + \mathbf{u}_{A_\varphi} \cdot \nabla\varphi = 0$  implique avec l'Eq. 4 que

$$S_\varphi = \frac{\Omega_\varphi(\underline{x}, t)}{|\nabla\varphi|}. \tag{11}$$

Cette vitesse est définie en tout point de l'iso-surface. Dans le cas d'une flamme prémélangée turbulente,  $S_{\varphi=0}$  est la valeur locale de la vitesse relative du front de

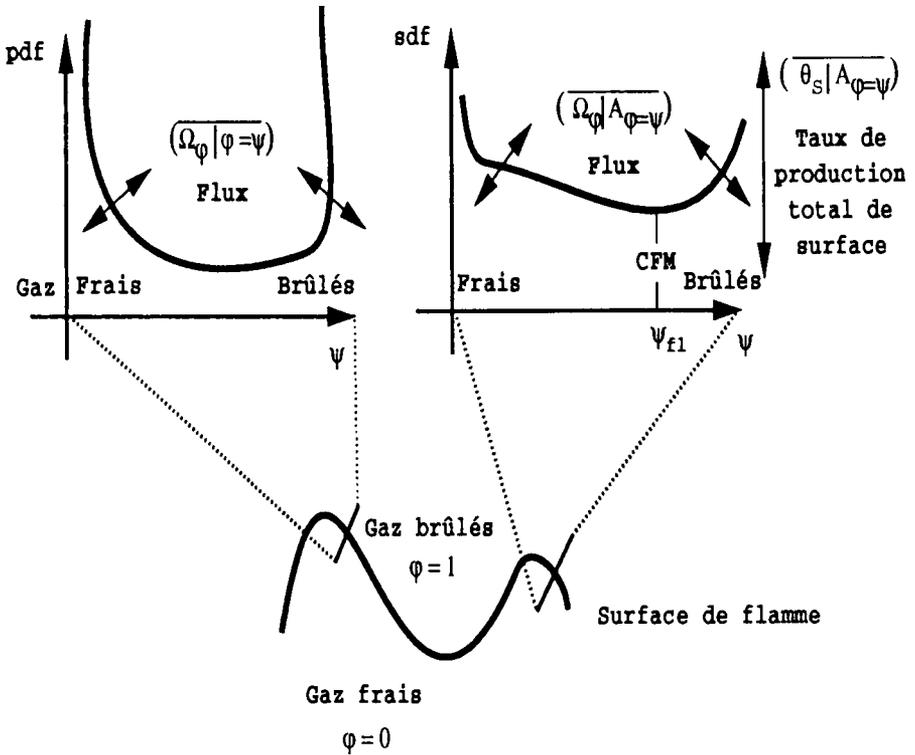


FIG. 7 – Cette figure illustre de façon schématique comment la pdf et la sdf sont transportées dans l'espace probabiliste  $\psi$  par le même mécanisme, le bilan entre les phénomènes diffusif et réactif. "cfm" indique la position de la description limitée à une iso-surface correspondante au modèle de flamme cohérente [CAN 90].

flamme, et caractérise la consommation chimique locale. L'introduction de  $S_\varphi$  dans l'Eq. 9 conduit à

$$\frac{D\overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)}}{Dt} = \left( \overline{\theta_s | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}} \right) \overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial \psi} \left[ \left( \overline{S_\varphi(\underline{x}, t) | \nabla \varphi(\underline{x}, t) | \mathcal{A}_{\varphi=\psi}} \right) \overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)} \right] \quad [12]$$

avec

$$\theta_s = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \left( \nabla \mathbf{u} + \frac{S_\varphi(\underline{x}, t)}{|\nabla \varphi(\underline{x}, t)|} \nabla(\nabla \varphi(\underline{x}, t)) \right) - \mathbf{n} \cdot \nabla S_\varphi(\underline{x}, t) \quad .$$

Ou encore en introduisant le fait que  $\mathbf{n} \cdot \nabla \delta(\psi - \varphi(\underline{x}, t)) = \frac{\partial \overline{\Sigma(\psi; \underline{x}, t)}}{\partial \psi}$ , l'équation pour la sdf devient

$$\frac{\partial \bar{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \left( \overline{\mathbf{u} + S_\varphi \mathbf{n}} \Big|_{\mathcal{A}_{\varphi=\psi}} \right) \bar{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t) \right) = \left( \overline{\phi_s + S_\varphi \nabla \cdot \mathbf{n}} \Big|_{\mathcal{A}_{\varphi=\psi}} \right) \bar{\Sigma}(\psi; \underline{x}, t) \quad [13]$$

où  $\phi_s = -\mathbf{nn}:\nabla\mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{u}$  est le taux d'étirement mesuré dans la direction tangentielle à la surface.

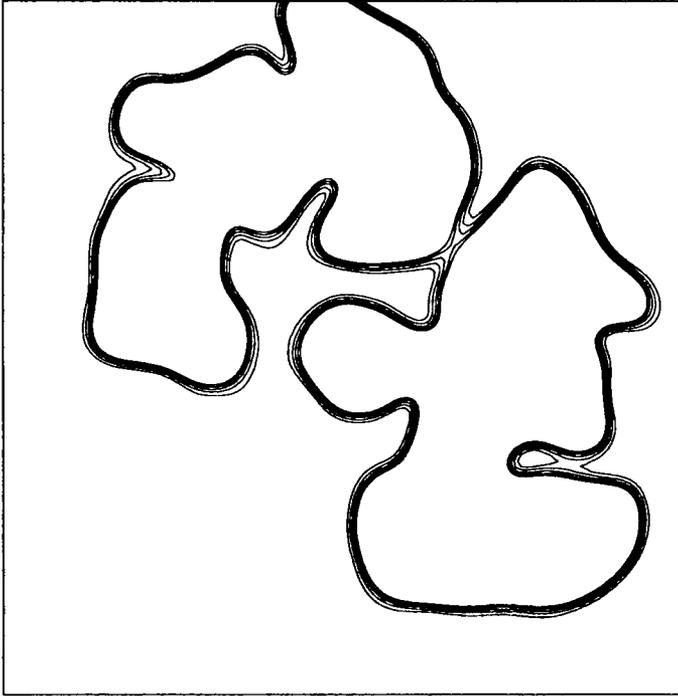


FIG. 8 – Surface de flamme, coupe 2D

#### 4.5 Relation entre surface de flamme et approche probabiliste

La démarche proposée dans le modèle de flamme cohérente, cfm, est basée sur la notion de densité de surface de flamme. Cette approche consiste à déterminer, en moyenne, la densité de surface par unité de volume d'une iso-concentration d'un

champ scalaire réactif caractéristique de la combustion. Cette iso-concentration est repérée à l'aide d'une valeur particulière du champ scalaire  $\psi = \psi_{fl}$ , considérée comme le lieu des points où les processus clés de la combustion (diffusion et réaction chimique) s'effectuent dans une zone dont l'épaisseur est, en ordre de grandeur, plus petite que toutes les échelles de la turbulence (hypothèse des flammelettes). Dans ces modélisations de type flammelette, la flamme est vue comme une interface et il est supposé que les propriétés à l'intérieur de cette interface peuvent être déduites à partir de celles connues en amont de l'interface [BRA 95].

En particulier l'hypothèse que les relations

$$\begin{aligned} \left( \mathbf{u} + S_\varphi \mathbf{n} \Big|_{\mathcal{A}_{\varphi=\psi_{fl}}} \right) &= \left( \mathbf{u} + S_\varphi \mathbf{n} \Big|_{\mathcal{A}_{\varphi=0}} \right) , \\ \left( \phi_s + S_\varphi \nabla \cdot \mathbf{n} \Big|_{\mathcal{A}_{\varphi=\psi_{fl}}} \right) &= \left( \phi_s + S_\varphi \nabla \cdot \mathbf{n} \Big|_{\mathcal{A}_{\varphi=0}} \right) , \end{aligned}$$

sont vérifiées permet de choisir pour  $\mathbf{u}$  la vitesse du fluide devant la flammelette et pour la vitesse relative de l'iso  $S_{\varphi=0}$ , la vitesse de combustion de la flamme prémélangée, à priori connue. L'Eq. 13 devient alors celle du modèle de flamme cohérente. Le cfm est donc une limitation de la sdf à une seule iso-surface  $\psi = \psi_{fl}$  (fig. 7).

Dans l'Eq. 12 les effets de chimie non-infiniment rapide sont pris en compte par  $\theta_s$  et les flux  $\partial/\partial\psi$ . Ces flux ne sont plus présents explicitement quand on limite la sdf à une seule iso-surface (Eq. 13). Ainsi le désir de prendre en compte les effets de courbure ou d'étirement du front de flamme, physiquement liés à la chimie non-infiniment rapide, est, en théorie, contradictoire avec la volonté de limiter la description à une seule iso. Il apparaît alors que le modèle de flamme cohérente déplace le problème de l'estimation de la moyenne conditionnée  $\left( \Omega_\varphi(\underline{x}, t) \Big|_{\varphi(\underline{x}, t) = \psi} \right)$ , rencontré avec le formalisme pdf, vers l'estimation des moyennes surfaciques trouvées dans l'Eq. 13. Dans la mesure où  $\Omega_\varphi(\underline{x}, t)$  et  $S_\varphi(\underline{x}, t)$  sont liés par l'Eq. 11, ces deux approches sont confrontées à des difficultés similaires quand les effets de chimie non-infiniment rapide doivent être introduits. Toutefois, comme indiqué sur la fig. 7, la description pdf-sdf en incluant l'ensemble des propriétés statistiques à la traversée de la flamme semble avoir un plus large champ d'applications [VER 95a].

#### 4.5 Structure interne des flammes prémélangées

Des bases de données tri-dimensionnelles 129X129X129 ont été réalisées avec le logiciel *Allegro*. La variable d'avancement de la réaction  $\varphi(\underline{x}, t)$  est initialisée de façon à obtenir des poches de gaz brûlés et de gaz frais en distribution statistiquement homogène. Une procédure a été développée afin de contrôler à la fois le spectre énergétique du champ turbulent  $\varphi(\underline{x}, t)$  ainsi que sa fonction densité de probabilité.

La turbulence est décroissante et les conditions du calcul sont les suivantes: le rapport de température entre les gaz brûlés et frais est égal à cinq, le nombre de Zel'dovich ( $\beta$ ) est égal à huit. Le rapport initial entre le taux de turbulence et la vitesse de flamme

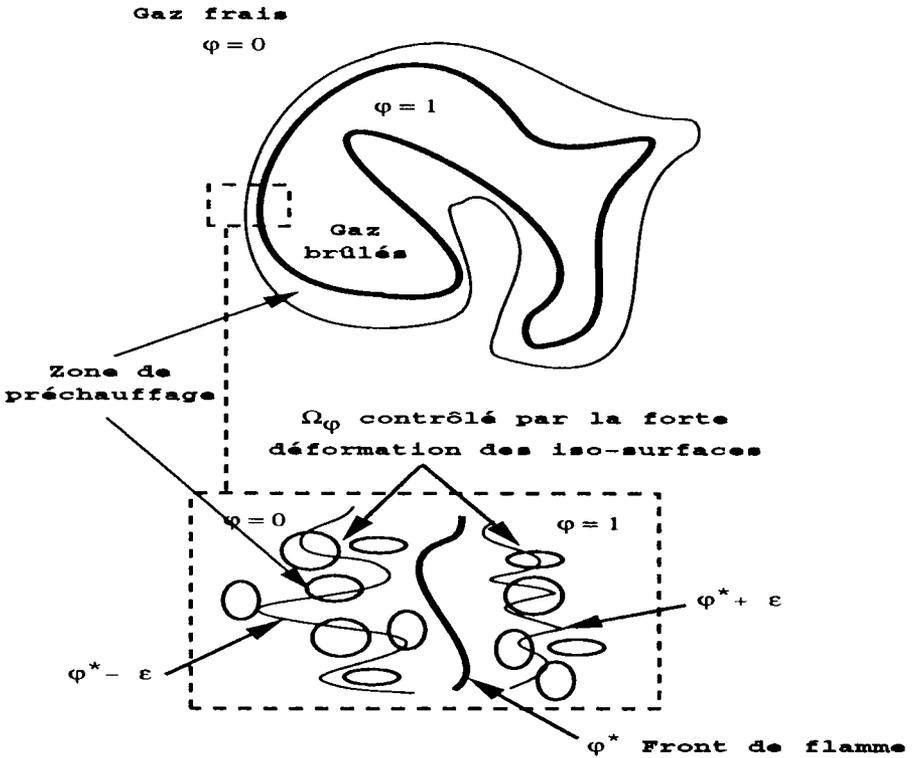


FIG. 9 – Schéma de la structure interne d'une flamme prémélangée turbulente.

laminaire est de l'ordre de trois, et la valeur d'un nombre de Damköhler construit à partir du temps de Kolmogorov et de la flamme laminaire est de l'ordre de l'unité. Le nombre de Reynolds turbulent initial basé sur l'échelle intégrale est de l'ordre de soixante dix, enfin le nombre de Reynolds basé sur la micro échelle de Taylor est de l'ordre de cinquante. On observe sur la fig. 8 la structure de la flamme prémélangée turbulente.

L'analyse des résultats suggère que la structure interne de la flamme turbulente prémélangée peut être schématisée comme présenté sur la fig. 9, c.a.d. deux zones de mélange séparées par des zones où l'activité chimique est plus intense. La fig. 10 présente la réponse des moyennes surfaciques à la traversée de la flamme. On note que la structure interne de la flamme est très proche de celle d'une flamme laminaire. Toutefois, dans la zone de préchauffage ( $\varphi < 0.5$ ) la flamme n'est pas capable de maintenir la structure laminaire à cause de la turbulence; ceci est particulièrement visible pour les quantités  $|\nabla\varphi(\underline{x}, t)|$  et  $S_\varphi(\underline{x}, t)$ . En conséquence, la moyenne surfacique de la vitesse relative des iso-surfaces s'éloigne de la réponse laminaire dans cette zone, le même effet est observé dans les gaz brûlés. Quand le nombre de Reynolds augmente, et que les interactions entre flammelettes deviennent de plus en plus fréquentes, cette

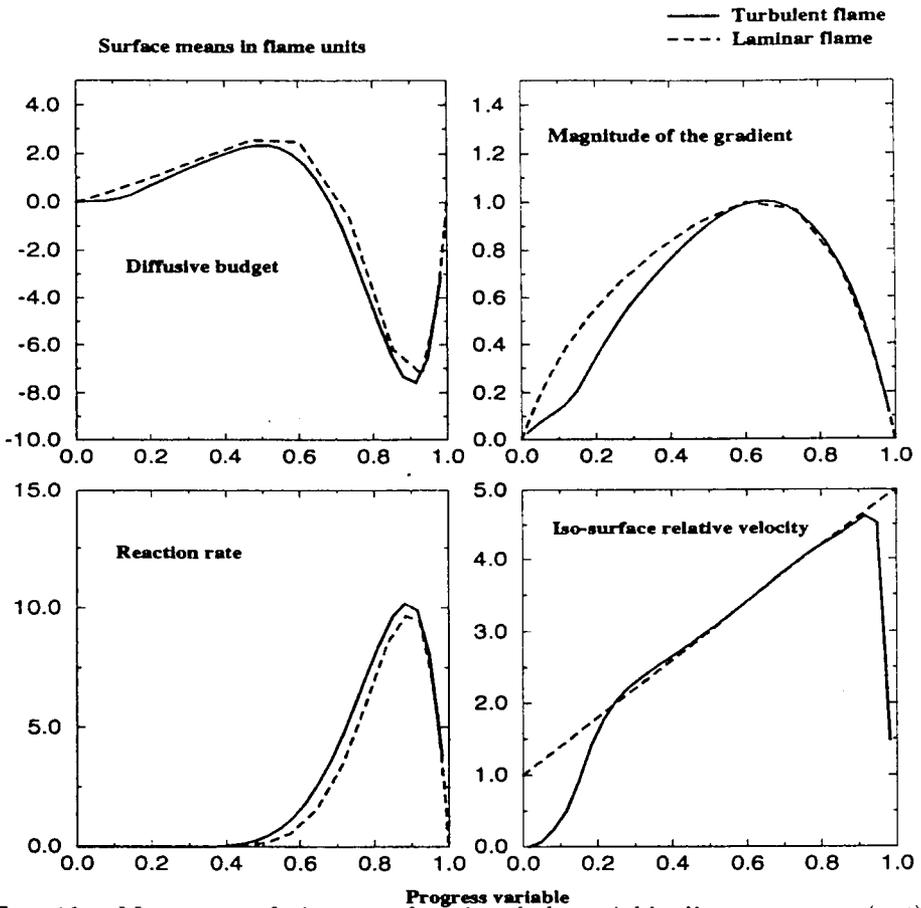


FIG. 10 - Moyenne surfaciques en fonction de la variable d'avancement  $\varphi(\underline{x}, t)$ .

déviations par rapport à la réponse laminaire doit très certainement s'accroître.

Ces résultats suggèrent qu'il existe des tourbillons capables de pénétrer la zone de préchauffage et de modifier la structure des iso-surfaces par rapport à celle observée dans une flamme laminaire. Récemment, une conclusion similaire a été obtenue à partir de mesures expérimentales [CHE 95]. Il est donc légitime de conclure que la modélisation de type pdf qui découple diffusion et réaction est appropriée pour traiter la zone de préchauffage, tandis qu'un traitement couplé diffusion-réaction doit être envisagé pour la zone où la chaleur est dégagée. Des modélisations de ce type ont été proposées [VER 95b].

## 5. L'approche "large eddy pdf" (lepdf)

### 5.1 Introduction

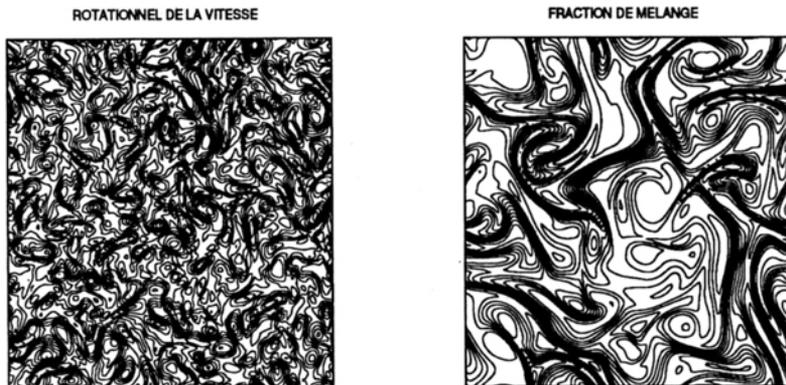


FIG. 11 – Coupe 2D d'un champ turbulent homogène isotrope.

La description sous forme spectrale des structures observées au sein des écoulements turbulents permet de caractériser les transferts d'énergie cinétique entre les différentes échelles de la turbulence. Les structures tourbillonnaires peuvent être, en effet, reliées à une fréquence de rotation. Ceci implique que les gros tourbillons tournant lentement se situent, dans l'espace spectral, au niveau des faibles fréquences contrairement aux petits tourbillons qui tournent rapidement. La fig. 12 montre le spectre énergétique  $E(k)$  d'une turbulence homogène isotrope en équilibre, en fonction du nombre d'onde  $k$ . Dans le cas d'une turbulence hors équilibre, le spectre énergétique présente toujours une structure en trois zones: l'énergie cinétique de la turbulence, notée  $K$  est produite par les grosses structures (zone 1), puis transférée par les structures de taille intermédiaires (zone 2) vers les plus petites (zone 3) pour y être dissipée. Il s'agit du phénomène de cascade énergétique. La dissipation de l'énergie est maximale au niveau des petites échelles où des frottements visqueux intenses liés aux forts gradients de vitesse sont observés. L'énergie cinétique moyenne du champ turbulent s'écrit  $K = \int_0^\infty E(k)dk$  et sa dissipation  $\epsilon = 2\nu \int_0^\infty k^2 E(k)dk$ .

Une des principales difficultés de la modélisation des écoulements turbulents réside dans la nécessité de représenter, dans une situation de turbulence hors équilibre, toutes les données du spectre réel de la turbulence, de la production à la dissipation de l'énergie.

Effectuer une simulation numérique directe (dns) présente l'avantage de simuler l'intégralité du spectre, mais nécessite une méthode numérique très précise et un maillage suffisamment raffiné pour permettre la représentation de toutes les structures de l'écoulement dont l'éventail de taille s'accroît avec le nombre de Reynolds. Le domaine d'utilisation de la simulation directe en combustion turbulente, où il est aussi nécessaire de résoudre la structure interne de la zone réactive, est donc limité à l'étude

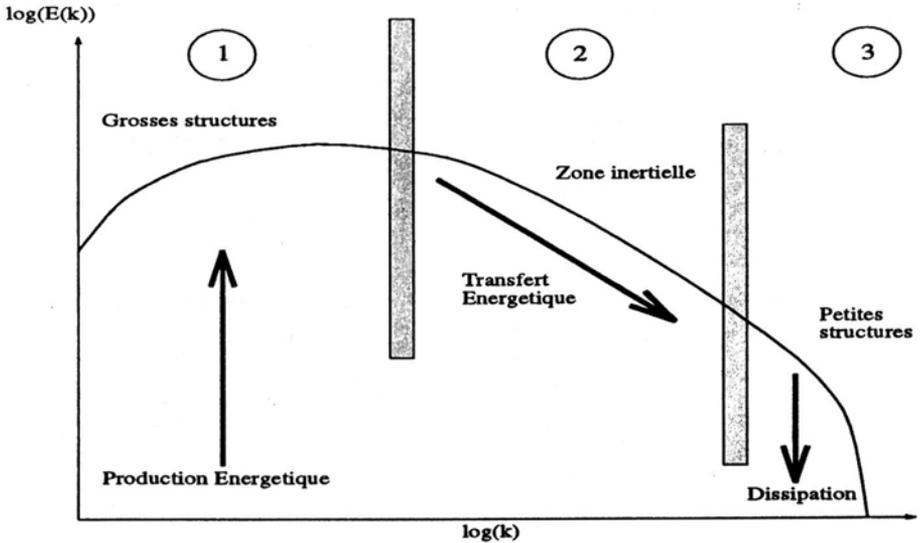


FIG. 12 – Spectre énergétique d'une turbulence en équilibre.

de problèmes modèles (voir ci-dessus).

Les modélisations intégrées sur tout le spectre, de type  $K - \epsilon$  par exemple, sont les plus usitées de nos jours dans les logiciels adaptés aux traitements des géométries complexes. Le spectre de la turbulence est modélisé à travers une description en un point qui contient les informations relatives à l'énergie cinétique de la turbulence  $K$  et de sa dissipation moyenne  $\epsilon$ .

Le développement de la simulation des grandes structures (les) s'est considérablement accéléré ces dernières années [GER 91]. Dans cette approche les grandes structures anisotropes sont exactement simulées tandis que les petites échelles sont modélisées. La frontière entre la modélisation et la simulation directe est donnée par une fréquence de coupure  $k_c$  située dans la zone inertielle du spectre d'énergie de la turbulence. Différents niveaux de complexité peuvent être introduit dans ces modélisations. Dans nos travaux la formulation dynamique a été retenue. Les paramètres de la modélisation sont alors déterminés de manière dynamique et dépendent des propriétés locales de l'écoulement. Le formalisme dynamique est particulièrement attrayant dans le cas des flammes turbulentes puisque la modélisation peut être sensible aux effets induits par le dégagement de chaleur. A ceci vient s'ajouter le fait que la stabilisation des brûleurs est souvent contrôlée par des zones de recirculation du fluide où les grandes structures jouent un rôle prépondérant, phénomènes mal capturés par les modélisations de type  $K - \epsilon$  [GAR 94]. Le développement de modèles de combustion turbulente couplés avec la simulation des grandes structures apparaît donc comme prometteur.

## 5.2 Le modèle de sous maille dynamique

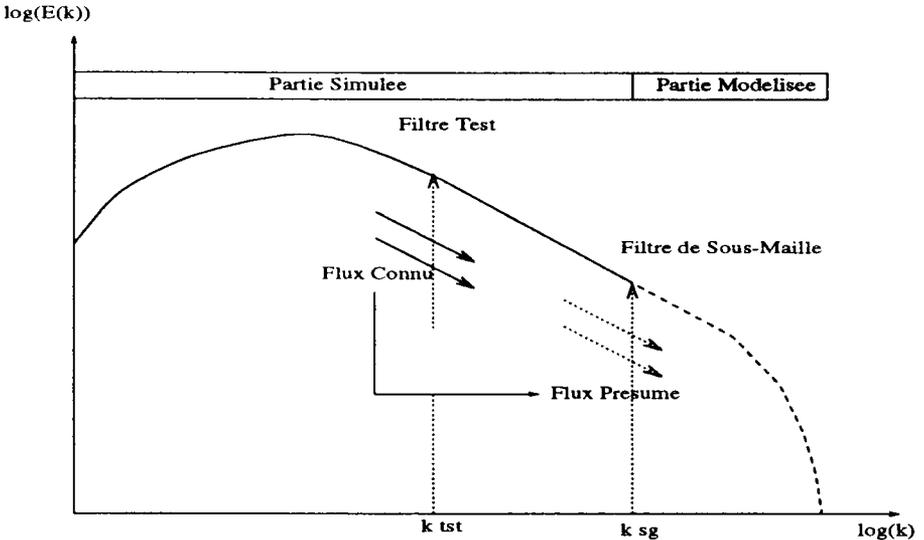


FIG. 13 – Coupure à deux niveaux du spectre énergétique.

La modélisation dynamique des grandes structures s'organise de la façon suivante: la première partie du spectre énergétique est exactement résolue. Afin de conserver uniquement les grandes structures de l'écoulement, un filtre est appliqué sur les équations caractérisant les milieux fluides. Il s'agit d'une opération de filtrage des petites structures notée  $\bar{\Delta}$  qui va 'couper' les hautes fréquences du spectre énergétique pour les nombres d'ondes  $k$  tel que  $k > k_{sg}$ . Cette réduction du spectre aux grandes structures de l'écoulement permettra d'effectuer une simulation directe de ces dernières.

La modélisation de la seconde partie du spectre énergétique s'effectue grâce à une représentation précise du transfert d'énergie de la zone inertielle vers les petites échelles. Dans le cas du formalisme dynamique, la détermination des paramètres de la modélisation utilisée pour représenter la dissipation nécessite un filtrage supplémentaire appelé 'filtrage test' à un niveau  $k_{tst}$  tel que  $k_{tst} < k_{sg}$ . Cette seconde coupure du spectre est effectuée dans la zone inertielle à une fréquence inférieure à celle de la coupure de sous-maille, et donc dans une zone du spectre où l'écoulement est exactement résolu (fig. 13). La quantification des flux d'énergie au niveau de ces deux coupures permet la détermination des coefficients utilisés dans la modélisation en fonction des propriétés locales de l'écoulement. Par conséquent, toute modification du spectre de la turbulence due à un changement des conditions aérodynamiques locales ou induite par un dégagement de chaleur se répercutera automatiquement sur les paramètres de la modélisation. La fig. 13 illustre symboliquement ces deux coupures du spectre, avec d'une part la partie simulée et d'autre part la partie modélisée.

Mathématiquement, l'opération de filtrage s'écrit sous la forme d'une convolution entre le signal turbulent et un filtre  $G(x)$  de largeur significative  $\bar{\Delta} = 2\pi/k_{sg}$ , tel

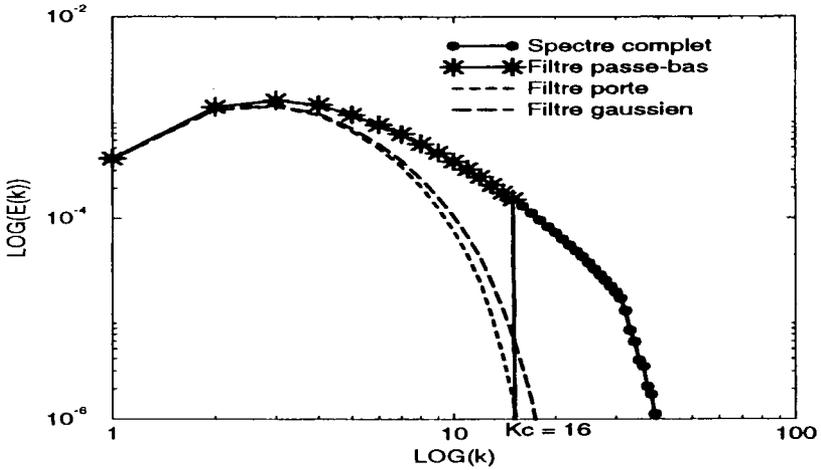


FIG. 14 – Action du filtrage sur le spectre énergétique.

que  $\int_{-\infty}^{+\infty} G(x)dx = 1$ . La fig. 14 montre les deux filtres de l'espace physique les plus communément utilisés: le filtre porte et le filtre gaussien. Il est possible d'utiliser un filtre 'passe bas' dans l'espace spectral qui éliminera tous les petits tourbillons dont le nombre d'onde est supérieur à  $k_c$ . Les filtres de l'espace physique présentent de nombreux avantages dans le cas des géométries complexes pour le traitement des conditions aux limites. Un spectre énergétique complet est présenté fig. 14 ainsi que l'action sur ce spectre des différents filtres qui viennent d'être évoqués.

L'opération de convolution entre une quantité physique (vitesse, concentration...) et l'opérateur de filtrage s'écrit

$$\bar{S}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(x')G(x - x')dx' .$$

Physiquement, cela correspond à une opération de moyenne locale. En tout point du champ, le filtre porte assigne la moyenne du signal située dans la zone de filtrage, alors que le filtre gaussien pondère cette moyenne par la distance au point considéré.

Une fluctuation au sens du filtrage peut être définie, par similitude avec la fluctuation au sens de Reynolds. Notée  $A'$ , elle s'exprime de la manière suivante:  $A' = A - \bar{A}$ . Par contre, l'utilisation de ces filtres est différente d'une moyenne d'ensemble classique car les propriétés des moyennes de Reynolds ne sont pas vérifiées:  $\overline{A'} \neq 0$  et  $\overline{\bar{B}A'} \neq 0$ . En revanche, il est facile de démontrer que  $\nabla \bar{A} = \overline{\nabla A}$ . Un filtrage pondéré par la masse volumique  $\tilde{u} = \overline{\rho u} / \bar{\rho}$  prenant en compte la compressibilité du milieu est utilisé pour les composantes du vecteur vitesse.

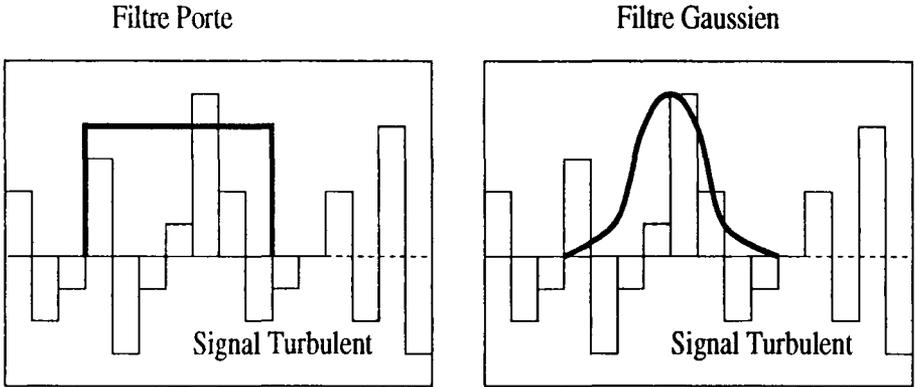


FIG. 15 – Deux filtres de l'espace physique.

### 5.3 Filtrage et modélisation des équations de transport

Les équations de transport sous formes adimensionnelles auxquelles l'opérateur de filtrage a été appliqué s'écrivent sous forme indiciale:

$$\text{Masse : } \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0$$

$$\begin{aligned} \text{Moments : } & \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} \\ & + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \frac{\bar{\mu}}{Re} \left( \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{(\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j))}_{\tau_{ij}} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Energie : } & \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_{th}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{e}_{th} \tilde{u}_i}{\partial x_i} \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\bar{\mu}}{Re} \frac{c_p}{Pr} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \right) - \frac{\bar{\mu}}{Re} \left( \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \\ & + \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{(\bar{\rho} (\tilde{e}_{th} \tilde{u}_i - \tilde{e}_{th} \tilde{u}_i))}_{q_i} = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Fraction massique : } & \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y} \tilde{u}_i}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\bar{\mu}}{Re S_c} \frac{\partial \tilde{Y}}{\partial x_i} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{(\bar{\rho} (\tilde{Y} \tilde{u}_i - \tilde{Y} \tilde{u}_i))}_{q'_i} = 0 \end{aligned}$$

Les termes inconnus  $\tau_{ij} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ ,  $q_i = \bar{\rho}(e_{th} \widetilde{u}_i - e_{th} \tilde{u}_i)$  et  $q'_i = \bar{\rho}(\widetilde{Y_\alpha u_i} - \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_i)$  doivent être fermés. La modélisation des phénomènes aérodynamiques présentés dans la suite s'inspire des travaux de Moin *et al* [MOI 91] et Me-neveau *et al* [MEN 95]. Le caractère novateur du travail présenté ici réside dans l'application de cette modélisation aux flammes turbulentes non-prémélangées. Une description de type pdf [GAO 93] est retenue pour représenter la combustion.

Dans le cas des flammes turbulentes non-prémélangées, on définit une fonction densité de probabilité représentative du comportement statistique aux grandes échelles de l'écoulement de la fraction de mélange  $Z$ . La lepdf (large eddy pdf) est définie par analogie avec l'Eq. 1 sous la forme

$$\bar{P}_{sg}(\psi, x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\psi - Z(x')) G(x - x') dx' \quad , \quad [14]$$

et permet de prendre en compte dans la modélisation les fluctuations de richesse du milieu.

En définissant une viscosité turbulente

$$\nu_t = C_s \bar{\Delta}^2 | \tilde{S} | \quad ,$$

qui va contrôler le transfert énergétique vers les petites structures, les contraintes de sous-maîles  $\tau_{ij}$  s'écriront en fonction du tenseur de déformation

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad , \quad | \tilde{S} | = \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}} \quad ,$$

sous la forme

$$\tau_{ij} = -2C_s \bar{\Delta}^2 \bar{\rho} | \tilde{S} | \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} \tau_{kk} \quad .$$

En turbulence compressible, il est aussi nécessaire de modéliser la partie isotrope  $\tau_{kk}$  du tenseur  $\tau_{ij}$ . Yoshizawa [YOS 86] propose d'écrire  $\tau_{kk} = 2C_I \bar{\Delta}^2 \bar{\rho} | \tilde{S} |^2$ , alors

$$\tau_{ij} = -2C_s \bar{\Delta}^2 \bar{\rho} | \tilde{S} | \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} \left( 2C_I \bar{\Delta}^2 \bar{\rho} | \tilde{S} |^2 \right) \quad , \quad [15]$$

où les paramètres  $C_s$  et  $C_I$  restent indéterminés. L'opération de double filtrage (fig. 13) est utilisée pour déterminer  $C_s$  et  $C_I$ . En effet, au niveau du filtre test  $\hat{A}$  (voir fig. 13), le tenseur des contraintes de sous maille s'écrit

$$T_{ij} = \widehat{\rho u_i u_j} - \frac{\widehat{\rho u_i} \widehat{\rho u_j}}{\widehat{\rho}} \quad ,$$

et sera modélisé par

$$T_{ij} = -2C_s \hat{\Delta}^2 \hat{\rho} | \hat{S} | \left( \hat{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \hat{S}_{kk} \right) + \frac{1}{3} \delta_{ij} \left( 2C_I \hat{\Delta}^2 \hat{\rho} | \hat{S} |^2 \right) \quad . \quad [16]$$

### Coefficients Dynamiques

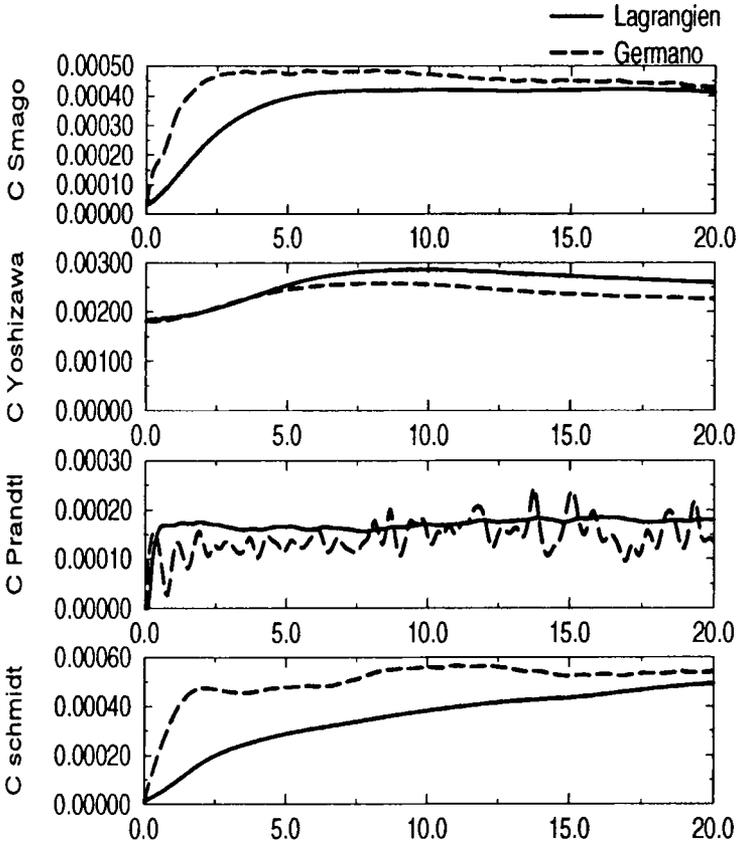


FIG. 16 – Evolution temporelle des coefficients dynamiques.

Les termes du type  $\tilde{A}$  et  $\tilde{A}$  peuvent être directement estimés puisque toutes les échelles de la turbulence sont résolues jusqu'au niveau de filtrage  $\hat{A}$ . La procédure de détermination des coefficients de la modélisation introduit le tenseur de Léonard [LEO 74]

$$L_{ij} = T_{ij} - \hat{\tau}_{ij} = \widehat{\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j} - \frac{\widehat{\rho u_i} \widehat{\rho u_j}}{\hat{\rho}}$$

D'autre part, en définissant le tenseur  $M_{ij}$  comme la partie anisotropique de l'expression modélisée du tenseur de Léonard  $L_{ij}$ , et en introduisant la notation  $\hat{A} = \|\hat{A}\|$  on a

$$M_{ij} = - \left[ \hat{\rho} |\tilde{S}| \left( \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) \hat{\rho} - \hat{\rho} \frac{\hat{\Delta}^2}{\Delta^2} |\hat{\tilde{S}}| \left( \hat{\tilde{S}}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \hat{\tilde{S}}_{kk} \right) \right] ,$$

qui implique

$$L_{ij} = -2C_s \bar{\Delta}^2 M_{ij} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \left[ 2C_I \bar{\Delta}^2 \left( \hat{\rho} \frac{\hat{\Delta}^2}{\Delta^2} |\hat{\tilde{S}}|^2 - \widehat{\rho |\tilde{S}|^2} \right) \right] .$$

L'introduction du tenseur  $\mathcal{L}_{ij}$  tel que

$$L_{ij} = C_s M_{ij} \quad [17]$$

exprime sous forme synthétique la relation qui permet de déterminer le paramètre  $C_s$ . Ce dernier est donc la solution d'un système surdimensionné. Plusieurs techniques ont été proposées afin de déterminer  $C_s$  à partir de l'Eq. 17. Germano *et al* [GER 91] proposent d'obtenir  $C_s$  par contraction de l'Eq. 17 avec le tenseur de cisaillement de sous-maille  $\tilde{S}_{ij}$ , le tout moyenné selon les directions homogènes à l'écoulement. Lilly [LIL 91] optimise cette procédure en prenant la solution dont l'erreur est minimale. Nous avons retenu l'approche récemment proposée par Meneveau *et al* [MEN 95]; l'erreur  $e_{ij} = C_s M_{ij} - \mathcal{L}_{ij}$  est minimisée le long des lignes de courant et la constante est moyennée le long de ces mêmes lignes, ce qui permet de simuler des écoulements sans aucune direction homogène. L'expression  $E$  de l'erreur totale le long de la ligne de courant s'écrit

$$E = \int_{-\infty}^t e_{ij}(z(t'), t') e_{ij}(z(t'), t') W(t - t') dt' \quad , \quad [18]$$

où  $W(t - t')$  est une fonction de pondération qui permet de limiter l'action des événements passés sur la constante. En fait plus un événement sera éloigné dans le temps plus son influence sera faible.

En posant  $\partial E / \partial C_s = 0$ , une relation pour la constante  $C_s$  est trouvée

$$C_s = \frac{\int_{-\infty}^t \mathcal{L}_{ij} M_{ij}(z(t'), t') W(t' - t) dt'}{\int_{-\infty}^t M_{ij} M_{ij}(z(t'), t') W(t' - t) dt'} \quad . \quad [19]$$

De même, pour la constante de Yoshizawa  $C_I$ , si nous posons

$$M_I = 2\bar{\Delta}^2 \left[ \frac{\hat{\Delta}^2}{\Delta^2} \hat{\rho} |\hat{\tilde{S}}|^2 - \widehat{\rho |\tilde{S}|^2} \right] \quad ,$$

alors

$$L_{kk} = C_I M_I \quad ,$$

et

$$C_I = \frac{\int_{-\infty}^t L_{kk} M_I(z(t'), t') W(t - t') dt'}{\int_{-\infty}^t M_I M_I(z(t'), t') W(t - t') dt'} \quad [20]$$

Les coefficients sont ainsi calculés dynamiquement, avec une pondération temporelle qui évite les trop fortes oscillations d'un pas de temps à un autre tout en prenant en compte la vitesse à laquelle l'énergie est transférée entre les filtres.

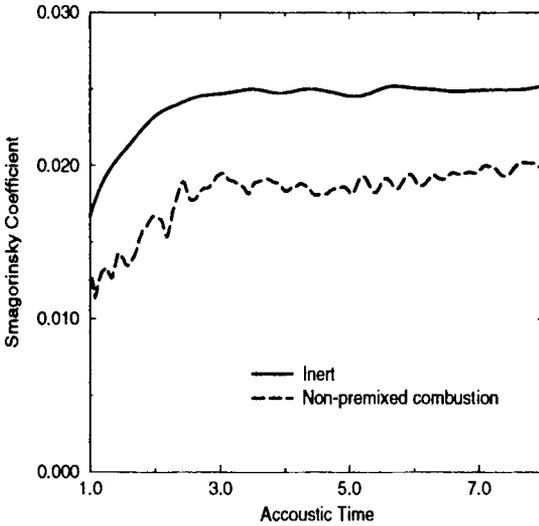


FIG. 17 – Auto-adaptation du modèle de turbulence à la combustion, coefficient de Smagorinsky  $C_s$ , cas inerte et réactif.

La modélisation et le calcul du nombre de Prandtl turbulent utilisé dans l'équation de l'énergie suit la même procédure que celle décrite précédemment pour l'équation des moments. Le terme à modéliser  $q_i = \bar{\rho} (\overline{e_{th} u_i} - \tilde{e}_{th} \tilde{u}_i)$  et son homologue au niveau du filtre test  $Q_i = \hat{\rho} (\widehat{e_{th} u_i} - \widehat{e}_{th} \widehat{u}_i)$  seront écrits

$$q_i = - \frac{\bar{\rho} \nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{e}_{th}}{\partial x_i}$$

et

$$Q_i = - \frac{\hat{\rho} \nu_t}{Pr_t} \frac{\partial \widehat{e}_{th}}{\partial x_i}$$

De même, l'expression du Prandtl turbulent s'obtient par la méthode lagrangienne

$$\frac{C_s}{Pr_t} = \frac{\int_{-\infty}^t P_i M_i(z(t'), t') W(t - t') dt'}{\int_{-\infty}^t M_i M_i(z(t'), t') W(t - t') dt'} \quad [21]$$

$$\text{avec } P_i = Q_i - \hat{q}_i = \frac{\overline{\rho u_i \overline{\rho e_{th}}}}{\bar{\rho}} - \frac{\overline{\rho u_i \overline{\rho e_{th}}}}{\hat{\rho}} \text{ et } M_i = \left\| \hat{\rho} \left[ \tilde{S} \right] \frac{\partial \tilde{e}_{th}}{\partial x_i} \right\| - \hat{\rho} \frac{\hat{\Delta}^2}{\Delta^2} \left[ \tilde{S} \right] \frac{\partial \tilde{e}_{th}}{\partial x_i}.$$

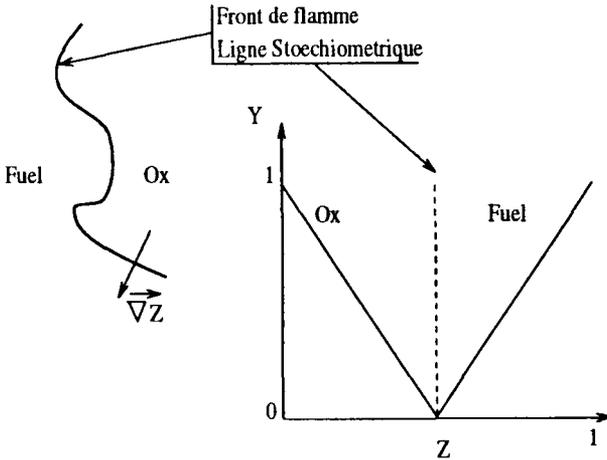


FIG. 18 – Evolution des espèces au niveau du front de flamme en hypothèse de chimie rapide contrôlée par le mélange.

La procédure est rigoureusement identique pour les fractions massiques des espèces chimiques en remplaçant  $e_{th}$  par  $Z$  et le rapport  $C_s/P_{r_t}$  par le rapport  $C_s/S_{c_t}$ .

Les coefficients utilisés dans la modélisation, calculés par la méthode proposée par Meneveau *et al* [MEN 94], permettent une description locale du transfert d'énergie vers les petites structures. De manière générale, les simulations montrent que de meilleurs résultats sont obtenus pour un écoulement quelconque par rapport au modèle de Germano [GER 91]. Pour une turbulence homogène isotrope, les performances restent identiques. Si une moyenne des coefficients lagrangiens est effectuée sur tout le champ, celle-ci tend vers la valeur du coefficient de Germano calculé dans les mêmes conditions. La fig. 15 montre les valeurs de  $2C_s\bar{\Delta}$ ,  $2C_I\bar{\Delta}$ ,  $C_s/P_{r_t}$  et  $C_s/S_{c_t}$ . La dépendance en temps des coefficients déterminés par la méthode lagrangienne apporte une plus grande stabilité et un temps d'établissement plus important. Les résultats présentés fig 15 sont relatifs à une simulation non réactive, 33X33X33 en situation de turbulence homogène isotrope décroissante. Le Reynolds basé sur l'échelle de Taylor est de l'ordre de 70. Le choix de cette petite valeur du nombre de Reynolds s'explique par la volonté de valider, dans un premier temps, la simulation des grandes structures par comparaison avec la simulation directe.

#### 5.4 Application à la combustion non prémélangée

Le calcul des brûleurs non-prémélangés fait souvent appel à une hypothèse de chimie infiniment rapide [GAR 94]. Nous avons donc testé le couplage entre la description dynamique de la turbulence avec un modèle de combustion faisant appel à une hypothèse de grand nombre de Damköhler. Dans les simulations présentées ci-

après, la structure interne de la flamme est donc entièrement contrôlée par le mélange du fuel et de l'oxydant. L'effet des fluctuations locales de richesse est pris en compte par le biais de la fonction densité de probabilité  $\bar{P}_{s,g}(\psi; \underline{x}, t)$  de la fraction de mélange  $Z(\underline{x}, t)$  (fig. 18).

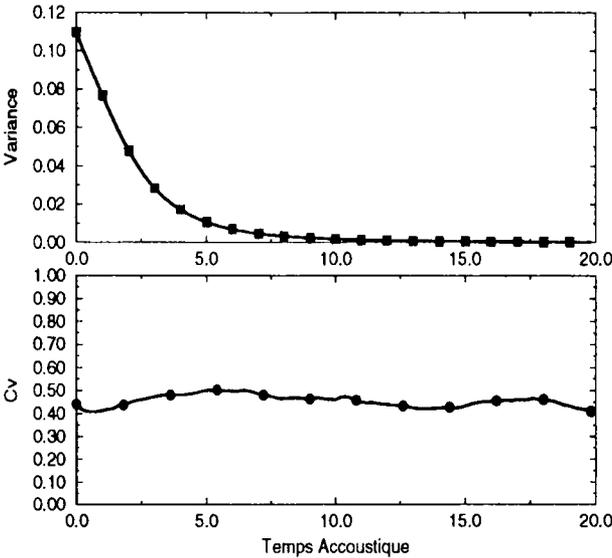


FIG. 19 – Evolution temporelle de  $C_v$  et de la variance du champ de fraction de mélange.

La pdf  $\bar{P}_{s,g}(\psi; \underline{x}, t)$  est présumée à partir des deux moments  $\bar{Z}$  et  $\overline{Z'^2}$  sous la forme d'une fonction bêta [BOR 88]. Il est donc nécessaire, en plus de la valeur filtrée  $\bar{Z}$  de connaître la variance de sous-maille  $\overline{Z'^2} = \overline{Z^2} - \bar{Z}^2$  qui doit être modélisée. Dans une première approche, nous allons supposer que dans la zone inertielle il existe une relation linéaire entre les variances estimées pour différentes tailles de filtre [COOK 94]. Alors,

$$\overline{Z'^2} \simeq C_v \widehat{Z'^2} = C_v \left( \widehat{Z^2} - \widehat{Z}^2 \right) , \tag{22}$$

où  $C_v$  est une constante. Une étude par simulation directe a été effectuée afin de contrôler la validité de cette hypothèse, en particulier en présence de grandes variations de gradients de la fraction de mélange  $Z$ . Pour cela, une turbulence décroissante a été simulée avec, au temps initial, des gradients de  $Z$  importants. Les variations de  $C_v$  ont été suivies jusqu'à de très faibles valeurs des gradients. La fig. 19 montre d'une part l'évolution de la variance au sens de Reynolds qui traduit l'intensité des fluctuations et d'autre part, de la valeur moyenne de  $C_v$  au cours du temps calculée à partir de l'Eq. 22. Les variations de  $C_v$  ne dépassent pas 10 % de sa valeur initiale

qui sera celle utilisée comme constante dans la simulation des grandes structures. Il est important de noter que  $C_v$  est une constante qui dépend du maillage et de la taille des filtres utilisés.

Afin de valider la modélisation lepdf, une simulation des grandes structures et, de manière totalement indépendante i.e. sans couplage à priori, une simulation numérique directe ont été effectuées. Le seul point commun entre les simulations des grandes structures et la simulation directe est le champ turbulent initial, celui de la simulation des grandes structures étant celui de la simulation directe coupé au niveau du filtre de sous-maille. La comparaison des résultats est effectuée sur le champ de température. Pour ce faire, on compare les évolutions temporelles des champs obtenus par la simulation des grandes structures avec les champs filtrés de simulations directes. La fig. 20 montre la capacité du modèle à capturer les valeurs minimales, moyennes et maximales de la température sur tout le champ de même que l'évolution au cours du temps de la pdf de la température, fig. 21.

La fig. 17 présente l'évolution temporelle du coefficient  $C_s$  dans les cas d'écoulements inerte et réactif. On note que la valeur prise par  $C_s$  dépend de l'activité chimique. La méthode lepdf offre donc la possibilité de prendre en compte l'effet du dégagement de chaleur sur la turbulence, ceci à travers une modification dynamique des coefficients utilisés dans la modélisation. La diminution de  $C_s$  dans le cas réactif s'explique par le fait que le dégagement de chaleur diminue la quantité d'énergie contenue dans la sous maille.

## 6. Conclusion

La faisabilité du couplage entre une simulation dynamique des grandes structures avec un modèle de combustion de type probabiliste a été montrée, et son application à des écoulements plus complexes peut être maintenant envisagée. Avec, entre autre, le développement d'un modèle de mélange dynamique permettant de fermer l'équation de transport de la pdf de sous-maille. En effet, il semble possible de définir un modèle de sous-maille pour la diffusion aux petites échelles utilisant l'information apportée par les grandes échelles spécifique à la LES.

Dans ce contexte, il sera aussi nécessaire dans un avenir proche, d'utiliser les informations issues d'études expérimentales afin de tester les hypothèses de la modélisation dynamique des grandes échelles. Non seulement en terme de comportement moyen, mais aussi en terme de représentation du flux d'énergie dissipée vers les petites échelles.

## Remerciement

Les auteurs ont bénéficié de nombreuses discussions avec les professeurs R. Borghi (U. de Rouen), K.N.C. Bray (U. of Cambridge UK), et Dr. P. Domingo (U. de Rouen), G. Ruetsch (CTR-Stanford, CA).

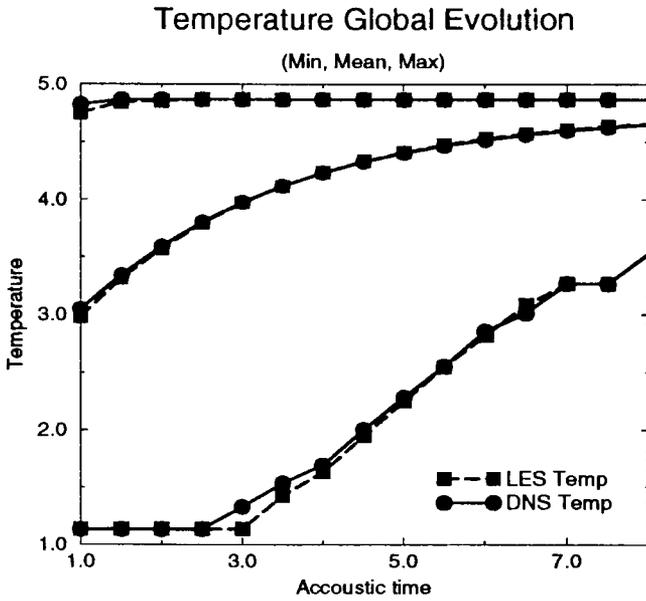


FIG. 20 – Comparaison dns-filtrée/les: evolution de la température.

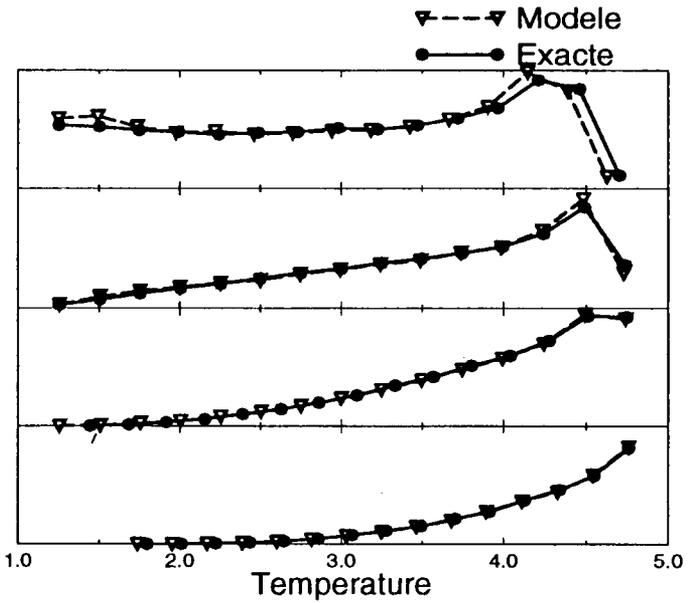


FIG. 21 – Comparaison dns-filtrée/les: pdf de la température.

## Bibliographie

- [BOR 88] BORGHI, R., "Turbulent combustion modelling", *Progr. Energy Comb. Sci.*, 14, 1988.
- [BOR 91] BORGHI, R., VERVISCH, L., GARRETON, D., "The calculation of local fluctuations in non-premixed turbulent flames" (Eds. Carvalho M.G., Lockwood, F., Taine, J.), Springer Verlag, 1991, pp 83-113
- [BRA 95] BRAY, K.N.C., "Turbulent transport in flames", *O. Reynolds Centenary Symp. Volume*, Proc. R. Soc., 1995, London
- [CAN 90] Candel S.M., Poinso T.J., "Flame stretch and the balance equation for the flame area", *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 70, 1990, pp. 1-15
- [CHE 95] CHEN M., "Measurements of the inner layer temperature in highly stretched turbulent bunsen flames", *Ph-D Thesis*, 1995, Technischen Hochschule Aachen
- [CLA 94] CLAVIN, P., "Premixed combustion and gazdynamics", *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 26, 1994, pp 321-52
- [COO 94] COOK, A.W. et RILEY, J.J., "A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows", *Phys. Fluids*, vol. 8, num. 6, 1993, pp. 2868-2870
- [DOL 89] DOLD, J.W., "Flame propagation in a nonuniform mixture: Analysis of a slowly varying triple flame", *Combust. and Flame*, 76, 1983, pp. 71-88
- [DOP 94] DOPAZO, C., "Recent developments in pdf methods", *In Turbulent Reacting Flows* (Eds P. A. Libby and F. A. Williams), Academic Press London, 1994, pp. 375-474.
- [FOX 94] FOX, "Improved Fokker-Planck model for the joint scalar, scalar gradient pdf", *Phys. of Fluid*, 6 (1), 1994, pp 334-348
- [GAO 93] GAO, F. et O'BRIEN E.E., "A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows", *Phys. Fluids*, vol. 5, num. 6, 1993, pp. 1282-1284
- [GAR 94] GARRETON, D., SIMONIN, O., "First A.S.C.F. Workshop", Chatou, France, October, 17-18, 1994
- [GER 91] GERMANO, M., PIOMELLI, U., MOIN, P. et CABOT, W.H., "A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model", *Phys. Fluids*, vol. 7, num. 3, 1991, pp. 1760-1765
- [GUI 95] GUICHARD, L., VERVISCH, L., DOMINGO, P., "Two dimensional weak shock-vortex interaction in a mixing zone", *AIAA Journal*, Vol 33 (10), 1995
- [KIO 93] KIONI, P.N., ROGG, B., BRAY, K.N.C., LINAN, A. "Flame spread in laminar mixing layers: The triple flame", *Comb. and Flame*, 95, 1993, pp 276-296
- [KOL 94] KOLLMANN, W., CHEN, J. H. "Dynamics of the flame surface area in turbulent non-premixed combustion", *Twenty-Fifth International Symp. on Comb.*, to be published, 1994.
- [LEL 90] LELE, S. K., "Compact finite difference schemes with spectral like resolution", *Center for Turbulence Research Rept.*, Stanford University, 1990.
- [LEO 74] LEONARD, A., "Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows", *Adv. Geophys*, 18A, 1974, pp. 237-248
- [LIL 91] LILLY, D. K., "A proposed modification of the Germano subgrid-scale closure method", *Phys. Fluids*, vol. 3, num. 4, 1991, pp. 633-635
- [LIN 94] LINAN, A., "Ignition and flame spread in laminar mixing layers", in *Combustion in High speed Flows*, Kluwer Academic Publishers, Boston, 1994, p. 461
- [MEN 94] MENEVEAU, C., LUND, T.S. et CABOT, W., "A Lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence", *Center for Turbulence Research, Proceeding of the 1994 Summer Program*, 1994, pp. 271-299
- [MOI 91] MOIN, P., SQUIRES, K., CABOT, W. et LEE, S. "A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport" *Phys. Fluids*, vol. 3, num. 11, 1991, pp. 2746-2757

- [PHI 65] PHILIPS, H., "Flame spread in a buoyant layer", *Tenth International Symposium on Combustion*, Cambridge, 1965, p 1277
- [POI 91] POINSOT, T., LELE, S. K., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows", *Journal of Computational Physics*, Vol. 101, No 1, 1992, pp. 104-129.
- [POP 88] POPE, S.B., "Evolution of surface in turbulence", *International J. Engng. Sci.*, 26, 1988, pp 445-469
- [POP 91] POPE, S.B., "Computations of turbulent combustion: progress and challenges", *Twenty-Third Symposium (International) on Comb.*, 1990, pp. 591-612
- [RUE 94] RUETSCH, G.R., VERVISCH, L., LINAN, A. "Effects of heat release on triple flames", *Phys. Fluids*, 7 (6), 1995, pp. 1447-1454
- [TRO 94] TROUVE A., POINSOT, T., "The evolution for the flame surface density in turbulent premixed combustion", *Journal of Fluid Mechanics*, 261, 1994, pp. 1-31
- [VEY 94] VEYNANTE, D., DUCLOS, J.M., PIANA, J., "Experimental analysis of flamelet models for premixed combustion", *Twenty-Fifth International Symp. on Comb*, 1994, to be published
- [VER 95a] VERVISCH, L., BIDAUX, E, BRAY, K.N.C., KOLLMANN, W., "Surface density function in premixed combustion modelling, similarities between pdf and flame surface approaches", *Phys. Fluids*, 7 (10), 1995
- [VER 95b] VERVISCH, L., KOLLMANN, W., BRAY K.N.C., MANTEL, T., "Pdf modeling for premixed turbulent combustion based on the properties of iso-concentration surfaces", in *Proceedings of the 1994 CTR Summer Program, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.*, 1995, pp 125-150
- [YOS 86] YOSHIKAWA, A., "Statistical theory for compressible turbulent shear flow with the application to subgrid modeling", *Phys. Fluids*, vol. 29, num. 7, 1986, pp. 2152-2184