

REPUBLIQUE DU CAMEROUN

Paix Travail Patrie

UNIVERSITE DE YAOUNDE I

CENTRE DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE/ SCIENCES
TECHNOLOGIES ET GEOSCIENCES

UNITE DE RECHERCHE ET DE
FORMATION DOCTORALE EN
PHYSIQUES ET APPLICATIONS

B.P : 812 Yaoundé

Email : crfd_stg@uy1.uninet.cm

Site web : www.uy1researchstg.cm



REPUBLIC OF CAMEROON

Peace Work fatherland

THE UNIVERSITY OF YAOUNDE I

POSTGRADUATE SCHOOL OF SCIENCES
TECHNOLOGY AND GEOSCIENCES

RESEACH AND POSTGRADUATE
TRAINING UNIT FOR PHYSICS
AND APPLICATIONS

P.O. Box : 812 Yaounde

Email : crfd_stg@uy1.uninet.cm

Site web : www.uy1researchstg.cm

**LABORATOIRE D'ÉNERGIE ET SYSTEMES ÉLECTRIQUES
ET ÉLECTRONIQUES**

Option : ÉNERGIE ET ENVIRONNEMENT

THÈSE

**MODÉLISATION ET SIMULATION DE LA COMBUSTION
TURBULENTE D'UN BIOGAZ À L'AIDE D'UNE CINÉTIQUE
RÉDUITE DANS LE CODE OpenFOAM**

Rédigée et soutenue en vue de l'obtention du diplôme de Doctorat/Ph.D en Physique

par :

CHOPKAP NOUME Hermann

Matricule : 09W0051

Master en Physique

Sous la Co-Direction de :

OBOUNOU AKONG Marcel Brice

Maître de Conférences

Université de Yaoundé I

EKOBENA FOU DA Henri Paul

Professeur

Université de Yaoundé I



2022

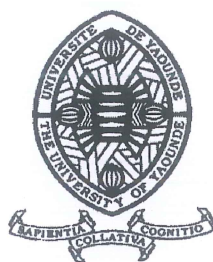
RÉPUBLIQUE DU CAMEROUN

Paix - Travail - Patrie

UNIVERSITÉ DE YAOUNDÉ I

FACULTÉ DES SCIENCES

DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE



REPUBLIC OF CAMEROON

Peace - Work - Fatherland

THE UNIVERSITY OF YAOUNDÉ I

FACULTY OF SCIENCE

DEPARTMENT OF PHYSICS

ATTESTATION DE CORRECTION DE LA THÈSE DE DOCTORAT/Ph.D

Nous, Professeur NJOMO Donatien, Président du Jury de soutenance, Professeur NANA NBENDJO Blaise Roméo et Professeur THIODJIO SENDJA Bridinette, Examineurs, de la thèse de Doctorat/Ph.D de Monsieur CHOPKAP NOUME Hermann, Matricule 09W0051, préparée sous la direction du Professeur OBOUNOU AKONG Marcel Brice et du Professeur EKOBEA FOUA Henri Paul, intitulée : «Modélisation et simulation de la combustion turbulente d'un biogaz à l'aide d'une cinétique réduite dans le code OpenFOAM», soutenue publiquement le vendredi, 08 Juillet 2022 en vue de l'obtention du grade de Docteur/Ph.D de l'Université de Yaoundé I en Physique, spécialité : Énergie et Systèmes Électriques et Électroniques, option : Energie et Environnement, attestons que toutes les corrections demandées par le Jury de soutenance ont été effectuées.

En foi de quoi la présente attestation lui est délivrée pour servir et valoir ce que de droit.

Fait à Yaoundé, le 18 JUL 2022

Les Examineurs

Le Président du Jury

Pr. NANA NBENDJO
Blaise Roméo

Pr. THIODJIO SENDJA
Bridinette

Pr. NJOMO Donatien

Le Chef de Département de Physique



Pr. NDJAKA Jean-Marie Bienvenu

THÈSE

Modélisation et Simulation de la Combustion Turbulente d'un Biogaz à l'Aide d'une Cinétique Réduite, Dans le Code OpenFOAM

LABORATOIRE D'ÉNERGIE, DES SYSTÈMES ÉLECTRIQUES
ET ÉLECTRONIQUES

option : ÉNERGIE ET ENVIRONNEMENT

Mémoire de thèse présenté en vue de l'obtention du diplôme
de Doctorat/Ph.D en Physique

par :

CHOPKAP NOUME Hermann

09W0051

Master en Sciences Physiques

Devant le jury de soutenance constitué ainsi qu'il suit :

<u>Président</u> :	NJOMO Donatien, Pr ;	Université de Yaoundé 1 ;
<u>Rapporteurs</u> :	EKOBENA FOU DA Henri Paul, Pr ;	Université de Yaoundé 1 ;
	OBOUNOU AKONG Marcel Brice †, MC ;	Université de Yaoundé 1 ;
<u>Membres</u> :	NANA NBENDJO Blaise Roméo, Pr ;	Université de Yaoundé 1 ;
	MOUANGUE Ruben Martin, Pr ;	Université de Douala ;
	THIODJIO SENDJA Bridinette, MC ;	Université de Yaoundé 1 ;
	VONDOU Debertini Appolinaire, MC ;	Université de Yaoundé 1 ;

Dédicace

À Dieu le Père tout Puissant et à Jésus Christ notre Seigneur.

Je lui rend grâce pour mon père Monsieur NOUME Joseph, parti très tôt et qui est resté un modèle pour nous ; pour ma mère Madame NOUME Jeanne qui n'a cessé de nous apporter son soutien et son amour, mais qui nous a quitté quand je finalisais ces travaux de thèse de Doctorat. Je lui suis également reconnaissant pour mon Encadreur le Professeur OBOUNOU AKONG Marcel Brice, qui a toujours été une source d'inspiration pour moi et aussi comme un père, mais qui malheureusement est décédé quelques mois avant que ce parcours Doctoral ne puisse s'achever.

Remerciements

Parvenu à la fin de mon parcours de recherche doctorale, qui a été ardu, mais aussi passionnant, je tiens à remercier tout ceux qui m'ont soutenu tout long de ce chemin parsemé d'embûches, mais qui aujourd'hui peut déboucher sur une issue favorable.

Tout d'abord, je rend Grâce à DIEU le tout Puissant, sans qui ce travail n'aurait pas été possible ; il reste fidèle pour ceux qui l'aiment.

J'exprime ma profonde gratitude à mes directeurs de thèse. Mes hommages au Professeur Marcel OBOU-NOU, pour la confiance qu'il m'a accordé, ses connaissances qu'il a su partager, et ses qualités humaines. Ma reconnaissance à l'endroit du Professeur Henri EKOBEA FOUA, mon co-directeur de thèse, pour son soutien et sa disponibilité malgré ses responsabilités administratives.

Toute ma gratitude aux experts et aux Jurys qui n'ont ménagés aucun effort pour évaluer ces travaux de recherche, au cours des différentes étapes servants à examiner cette thèse.

Je remercie tous les enseignants du Département de Physique de l'Université de Yaoundé I, pour l'encadrement dont j'ai bénéficié depuis mon inscription en première année de Licence.

Je remercie infiniment le Docteur Valentin BOMBA, Chargé de Cours à l'université de Maroua, pour avoir été mon mentor, pour m'avoir soutenu et conseillé tout au long de ce travail.

Je suis très reconnaissant au Docteur Emmanuel SAPNKEN de l'université de Douala (IUT) pour sa disponibilité à l'occasion de nos échanges scientifiques et la traduction de mes manuscrits d'articles.

Je tiens aussi à remercier les Professeurs Jean Gaston TAMBA et Ruben MOUANGUE de l'université de Douala, respectivement à l'IUT et à l'ENSPD, pour leurs conseils tout au long de mon parcours.

Mes remerciements vont aussi à l'endroit de mes aînés, amis et camarades du Laboratoire de l'Énergie et Environnement et du Groupement Camerounais de Combustion (GCC) : Dr Charles CHELEM (Chargé de Cours à l'université de Maroua), Dr David AWAKEM, Stéphane KENFACK, Dr Jean Paul GRAM SHOU, Junior BISSAI, Roméo KAMTA, Mahamat HASSANE BABIKIR, Bali TAMAGUE, Venant CHARA-DACKOU, et tous ceux que je n'ai pas cité, merci pour nos partages scientifiques.

Des remerciements particuliers à toute la famille NOUME : À ma maman, Jeanne NOUME, à qui j'aurais voulu adresser encore mes remerciements de vive voie, mais qui nous a quitté quelques mois avant la fin de ces travaux, je rend grâce à Dieu pour tout ce qu'elle a fait pour nous et pour son amour. À mes chéries, mon épouse et ma fille Bettina et Hazaël NOUME, un merci particulier pour leur patience et leur assistance qui m'ont toujours données la force d'avancer. À mes frères et sœurs les NOUME ; Arsène, Nélie, Christelle, Eliane ainsi que leurs conjoint(e)s, pour leur attention et leurs soutiens multi-formes. Ma gratitude va l'endroit de

tous mes oncles et tantes, en particulier À papa Bertrand NGUOKO qui a toujours été un papa attentionné pour nous, à Valery NOUMI et à maman Sylvie NGAMI. Toute ma gratitude à mon cousin Willy SEPLONG et à toute la famille MIEUTCHOUANGWOOU. Je suis également reconnaissant l'endroit de papa David et maman Rebecca TOUYM, à maman Angèle et toute ma belle famille. Une reconnaissance particulière à toute ma famille spirituelle, mes frères et sœurs en Christ ; je ne saurait citer chacun de manière individuelle, tellement elle est grande, mais surtout d'une immense bénédiction pour moi. Que notre Dieu vous bénisse tous, ainsi que tous ceux que je n'ai pas mentionné ; ce mémoire de thèse ne pourrai suffire pour vous dire merci.

Table des matières

Dédicace	i
Remerciements	ii
Table des matières	v
Nomenclature	vi
Table des figures	xiii
Liste des tableaux	xiv
Résumé	1
Abstract	2
Introduction Générale	4
1 Synthèse Bibliographique : Généralités sur les Flammes, sur les Mécanismes Chimiques et sur les Biogaz	8
Introduction	8
1.1 Les Modèles de Combustion Turbulente et les Modèles de Turbulence	8
1.1.1 Généralité sur les flammes turbulentes	8
1.1.2 Cinétique chimique	12
1.1.3 Les Modèles de Combustion	14
1.1.4 Les modèles de turbulences	21
1.2 Enjeux de la Réduction des Mécanismes Cinétiques et Etat de l'Art	24
1.2.1 Coût de calcul associé aux simulations	24
1.2.2 Importance de la réduction des mécanismes	25
1.2.3 Travaux antérieurs	26
1.3 Généralité sur les Biogaz	29
1.3.1 Production des biogaz	29
1.3.2 Valorisation du biogaz	31
1.3.3 État de l'art sur l'étude de la combustion du biogaz	32
1.3.4 La part du biogaz dans l'énergie au cameroun	33
Conclusion	35

2	Modélisations, Méthodes et Outils	38
	Introduction	38
2.1	Modélisation de la Combustion Turbulente	38
2.1.1	Équations de l'Aérothermochimie	38
2.1.2	Les Modèles de Turbulences	48
2.1.3	Modélisation du rayonnement	51
2.2	Méthodes de réduction des mécanismes détaillés aux mécanismes squelettiques	52
2.2.1	Principes de base	52
2.2.2	Méthode "Directed Relation Graph" (DRG)	53
2.2.3	Méthode "DRG-Aided Sensitivity Analysis" (DRGASA)	54
2.2.4	Mise en œuvre et organigramme des méthodes de réduction	56
2.2.5	Présentation des Mécanismes chimiques	58
2.3	Outils et Simulations Numériques	60
2.3.1	Présentation de Gmsh	60
2.3.2	Présentation du Code de OpenFOAM	61
2.3.3	Présentation du code cantera	67
2.3.4	Création de la Librairie CFD des Flammelettes dans cantera	67
2.4	Présentations des configurations expérimentales	68
2.4.1	Description de la flamme DLR-A	68
2.4.2	Description de la flamme OXYFLAM-2 A de l'IFRF	70
2.4.3	Présentation et description de la flamme Sandia D	70
	Conclusion	72
3	Résultats et Analyses : Réductions des Mécanismes, Simulations des Flammes Turbulentes et Applications aux Biogaz	74
3.1	Réduction des Mécanismes Chimiques	74
3.1.1	Mécanisme squelettique appliqué à l'Oxy-Methane	75
3.1.2	Mécanisme Squelettique de la flamme "CH ₄ /H ₂ /N ₂ -DLR-A"	76
3.1.3	Bibliothèque des flammelettes	77
3.2	Résultats des Simulations Numériques CFD	78
3.2.1	Simulations de la Flamme de "DLR-A" Sandia	78
3.2.2	La Flamme "OXYFLAM-2 A" de l'IFRF	93
3.2.3	La Flamme "D" de Sandia	97
3.2.4	Diagramme de dispersion de la flamme D	117
3.3	Caractérisation et combustion turbulente des biogaz	118
3.3.1	Caractérisation des biogaz	118
3.3.2	Combustion turbulente des biogaz dans configurations expérimentales	120
	Références bibliographiques	132

Nomenclature

A	=	Constante pré-exponentielle du taux de réaction d'Arrhenius [mole, cm ³ , sec]
c	=	Variable d'avancement de la réaction
$C_\mu, C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}, \sigma_k$ et σ_ε	=	Constantes du modèle $k - \varepsilon$
c_p	=	Capacité thermique spécifique à pression constante [J/(kg K)]
D_k	=	Coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange [m ² /s]
Da	=	Nombre de Damkhöler
E_a	=	Énergie d'activation [J/kg]
h_k	=	Enthalpie de l'espèce k [J/kg]
Ka	=	Nombre de Karlovitz
K_{fr}	=	Constantes de réaction forward
K_{br}	=	Constantes de réaction backward
k	=	Turbulent kinetic energy [m ² /s ²]
Le_k	=	Nombre de Lewis de l'espèce k
l_t	=	Échelle intégrale de longueur de turbulence [m]
N_{sp}	=	Nombre d'espèces qui réagissent dans une réaction de combustion
p	=	Pression [N/m ²]
Pr	=	Nombre de Prandtl
Pr_t	=	Nombre de Prandtl turbulent
Q_r	=	Taux de progression de la réaction
R	=	Constante universelle des gaz parfaits [J/(mol.K)]
Re	=	Nombre de Reynolds
Re_t	=	Nombre de Reynolds turbulent
Sc_{T_k}	=	Nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce k
S_L	=	Vitesse de la flamme laminaire [m/s]
T_a	=	Température d'activation [K]
T	=	Température [K]
t	=	Temps [s]
u_j	=	Composante j de la vitesse [m/s]
W_k	=	Masse molaire de l'espèce k [kg/mole]
Y_k	=	Fraction massique de l'espèce k
Z	=	Fraction de mélange

Lettres grecques

χ	=	Taux de dissipation scalaire [s^{-1}]
δ_{ij}	=	Symbole de Kronecker
δ_l	=	Épaisseur d'une flamme prémélangée laminaire plane non étirée [m]
$\tilde{\phi}$	=	La partie de la moyenne de Favre d'une grandeur ϕ
ϕ''	=	Partie fluctuante de Favre d'une grandeur ϕ
ε	=	Taux de dissipation des fluctuations des vitesses [m^2/s^3]
μ	=	Viscosité dynamique [$kg\ m^{-1}s^{-1}$]
ν	=	Viscosité cinématique [m^2s^{-1}]
ρ	=	Masse volumique [kg/m^3]
τ	=	Temps caractéristique [s]
τ_{ch}	=	Échelle de temps chimique [s]
τ_k	=	Temps de Kolmogorov [s]
τ_{mix}	=	Échelle de temps du mélange turbulent [s]
$\dot{\omega}_k$	=	Taux de réaction instantané de l'espèce k [s^{-1}]

Abréviations et acronymes

CFD	=	Computational Fluid Dynamics
CPU	=	Central Processing Unit
CSP	=	Computational Singular Perturbation
DNS	=	Direct Numerical Simulation
DLR	=	Deutsches Zentrum für Luft-und Raumfahrt
DRG	=	Directed Relation Graph
DRGASA	=	DRG-Aided Sensitivity Analysis
DRGEP	=	DRG-With Error Propagation
EDC	=	Eddy Dissipation Concept
GRI	=	Gas Research Institute
IEM	=	Interaction par Échange avec la Moyenne
IFRF	=	International Flame Research Foundation
LES	=	Large Eddy Simulation
MIL	=	Modèle Intermittent Lagrangien
OpenFOAM	=	Open Fields Operation And Manipulation
PaSR	=	Partial Stirred Reactor
PDF	=	Probability Density Function
RANS	=	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
REDIM	=	Reaction Diffusion Manifolds
RCCE	=	Rate-Controlled Constrained-Equilibrium
SLFM	=	Steady Laminar Flamelet Model

Table des figures

1.1	Régimes des flammes de prémélange turbulentes (diagramme de Borghi) [48].	11
1.2	Les différents structures d'une flamme de diffusion [53].	12
1.3	Diagramme en Z de Burke-Schumann représentant la structure d'une flamme de diffusion dans le cas d'une réaction infiniment rapide et irréversible [58]	15
1.4	Trajectoire des particules fluides dans l'espace des phases (ϕ, Y) pour une flamme de diffusion. [48]	19
1.5	Dépendance de la taille du mécanisme pour certains combustibles hydrocarbonés par rapport à la taille moléculaire et à la date de libération du mécanisme [107].	25
1.6	Étapes de la digestion anaérobique.	30
1.7	Energies primaires du Cameroun. [141]	34
2.1	Schémas décrivant le modèle de combustion PaSR.	43
2.2	Vue schématique d'une flamme à contre-courant.	45
2.3	Schéma de la procédure SLM mise en œuvre.	47
2.4	Organigramme de la procédure de réduction du squelette.	57
2.5	Séquences de procédure de simulation dans OpenFOAM	60
2.6	Interface graphique du logiciel de maillage Gmsh.	60
2.7	Organigramme "CFD" : pré-traitement, exécution des simulations et post-traitement.	66
2.8	Configuration de la géométrie et conditions aux limites.	69
2.9	Maillage axisymétrique 2D et Sensibilité au maillage pour la flamme DLR-A.	69
2.10	Description de la configuration 2D de l'OXYFLAM-2 A.	70
2.11	Description de la configuration de la flamme D de Sandia.	71
2.12	Détails du maillage 2D de la flamme D de Sandia : maillage de type "wedge".	71
2.13	Détails du maillage 3D de la flamme D de Sandia : description de la grille dans les plans $x - y$ et $y - z$	72
3.1	Profils de température et prédits calculés en utilisant le mécanisme GRI3.0 et le mécanisme squelettique pour une flamme de diffusion oxy-méthane : 100% O ₂ contre 100% CH ₄ et une vitesse de déformation de 62 000 s ⁻¹	75
3.2	Profils de réactifs et radicaux prédits, calculés en utilisant le mécanisme GRI3.0 et le mécanisme squelettique pour une flamme de diffusion oxy-méthane : 100% O ₂ contre 100% CH ₄ et une vitesse de déformation de 62 000 s ⁻¹	75
3.3	Comparaison des distributions de température dans l'espace de fraction de mélange obtenues avec le mécanisme squelettique C ₂ (21 espèces et 51 réactions) et le mécanisme GRI3.0 (53 espèces et 325 réactions) appliqués aux conditions de la flamme DLR-A.	76
3.4	Comparaison des distributions des espèces (réactifs, produits et radicaux) dans l'espace de fraction de mélange obtenues avec le mécanisme squelettique C ₂ (21 espèces et 51 réactions) et le mécanisme GRI3.0 (53 espèces et 325 réactions) appliqués aux conditions de la flamme DLR-A.	77

3.5	<i>Profils de température issue des bibliothèques de flammelettes de la flamme D de Sandia avec les mécanismes GRI 3.0 et squelettiques du DRG.</i>	78
3.6	<i>Distributions radiales de la vitesse à quatre endroits X/D différents.</i>	79
3.7	<i>Contours calculés de la température moyenne [K].</i>	79
3.8	<i>Profils radiaux de la température pour la DLR-A, aux positions axiales $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	80
3.9	<i>Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce CH_4 pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	80
3.10	<i>Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce H_2 pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	81
3.11	<i>Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce H_2O pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	81
3.12	<i>Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce CO_2 pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	82
3.13	<i>Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce CO pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	82
3.14	<i>Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce OH pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	83
3.15	<i>Profil axial de la température et des fractions massiques des espèces H_2O, CO_2, CO et OH; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.</i>	83
3.16	<i>Contours de température moyenne avec différents mécanismes.</i>	85
3.17	<i>Profils axiaux et radiaux de la fraction réactive κ décrit dans le modèle PaSR.</i>	85
3.18	<i>Profils radiaux de vitesses pour différents mécanismes appliqués à la DLR-A ($X/D = 5, 10, 20$ et 40).</i>	86
3.19	<i>Distributions axiales de la température moyenne et de la fraction massique moyenne de H_2O, CO_2 et CO obtenues avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme de C_2 (21 espèces et 51 réactions; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions; sept espèces et quatre réactions; ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions; ligne pointillée) en comparaison avec les données expérimentales (barre d'erreur avec symbole de cercle plein).</i>	87
3.20	<i>Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) de la température moyenne obtenues avec les quatre mécanismes chimiques ci-dessus mentionnés</i>	88
3.21	<i>Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) du H_2 obtenues avec les quatre mécanismes chimiques ci-dessus mentionnés.</i>	89
3.22	<i>Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) de CO_2 obtenues avec les quatre mécanismes chimiques ci-dessus mentionnés</i>	89

3.23	Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) du CO_2 avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme de C_2 (21 espèces et 51 réactions ; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions ; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions ; (sept espèces et quatre réactions ; ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions ; ligne pointillée) en comparaison avec les données expérimentales (barre d'erreur, avec symbole de cercle plein).	90
3.24	Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) du OH obtenues avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme de C_2 (21 espèces et 51 réactions ; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions ; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions ; (sept espèces et quatre réactions ; ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions ; ligne pointillée) en comparaison avec les données expérimentales (barre d'erreur, avec symbole de cercle plein).	91
3.25	Profil axial du taux de production de chaleur tel qu'obtenu avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme C_2 (21 espèces et 51 réactions ; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions ; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions ; point-point- ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions ; ligne pointillée).	91
3.26	Distributions axiales de la température moyenne et de la fraction massique moyenne de H_2O , CO_2 et CO obtenues avec les quatre modèles de turbulence : $k - \varepsilon$ standard (ligne pleine), $k - \varepsilon$ réalisable (ligne pointillée), $k - \varepsilon$ RNG (ligne pointillée-pointillée) et $k - \omega$ SST (ligne pointillée) en comparaison avec les mesures (barre d'erreur avec symbole de cercle plein).	92
3.27	Distributions radiales de la température moyenne à deux positions X/D différentes, obtenues avec les quatre modèles de turbulence : ci-dessus mentionnés, en comparaison avec les mesures (barre d'erreur avec symbole de cercle plein).	93
3.28	Profils radiaux de vitesse aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).	94
3.29	Profils radiaux de la température moyenne aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).	95
3.30	Profils radiaux du CH_4 aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).	96
3.31	Profils radiaux du O_2 aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).	96
3.32	Profils radiaux du CO_2 aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).	97
3.33	Profils radiaux du CO aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).	97
3.34	Comparaison des contours de température à l'aide des modèles EDC et PaSR, couplés aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique du DRG (GRI-EDC, DRG-EDC, GRI-PaSR et DRG-PaSR).	99

3.35	<i>Profils radiaux de la température aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplés aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	99
3.36	<i>Profils radiaux du CH_4 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	100
3.37	<i>Profils radiaux du H_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	101
3.38	<i>Profils radiaux du H_2O aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	101
3.39	<i>Profils radiaux du CO_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	102
3.40	<i>Profils radiaux du CO aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	102
3.41	<i>Profils radiaux du O_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	103
3.42	<i>Profils radiaux du N_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	103
3.43	<i>Profils radiaux du OH aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.</i>	104
3.44	<i>Comparaison RANS des contours de température à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique du DRG multi-étape (GRI-SLFM et DRG-SLFM).</i>	104
3.45	<i>Contour LES de température à l'aide du modèle SLFM couplé au mécanisme GRI 3.0 (LES GRI-SLFM).</i>	105
3.46	<i>Profils radiaux de la vitesse aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	105
3.47	<i>Profils radiaux de la fraction de mélange (Z), aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	106
3.48	<i>Profils axiaux de la vitesse, la température, le taux de dissipation, la fraction de mélange, les espèces H_2O, OH, CO et CO_2 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	107
3.49	<i>Profils radiaux de la température aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	108

3.50	<i>Profils radiaux du CH₄ aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	108
3.51	<i>Profils radiaux du O₂ aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	109
3.52	<i>Profils radiaux du N₂ aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	109
3.53	<i>Profils radiaux du CO₂ aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	110
3.54	<i>Profils radiaux du CO aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	110
3.55	<i>Profils radiaux du H₂O aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	111
3.56	<i>Profils radiaux du OH aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	111
3.57	<i>Profils radiaux de température dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	112
3.58	<i>Profils radiaux du CH₄ dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	112
3.59	<i>Profils radiaux du H₂ dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	113
3.60	<i>Profils radiaux du CO₂ dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	113
3.61	<i>Profils radiaux du CO dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	114
3.62	<i>Profils radiaux du H₂O dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	115
3.63	<i>Profils radiaux du O₂ dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	115
3.64	<i>Profils radiaux du N₂ dans l'espace de la fraction de mélange aux positions X/D = 1, 7.5, 15, 30 et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	116

3.65	<i>Profils radiaux du OH dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.</i>	116
3.66	<i>Comparaison 3D suivant les profils axiaux de la température en fonction du taux de dissipation du scalaire χ et la fraction de mélange Z, avec les mécanismes GRI 3.0 à gauche et squelettique C_2 à droite.</i>	117
3.67	<i>Diagrammes de dispersion de la température, les espèces CO et OH comparés aux valeurs moyennes.</i>	118
3.68	<i>Comparaison des potentiels de production de trois types de matière premières organiques (bouse de Vache, lisier de Mouton et lisier de Porc) [185].</i>	119
3.69	<i>Caractérisation et composition des biogaz issus des déchets organique d'origines animales (bouse de Vache, lisier de Mouton et lisier de Porc).</i>	120
3.70	<i>Contours de températures calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	122
3.71	<i>Contours de températures calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme squelettique de la DRG, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	122
3.72	<i>Contours de températures calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	123
3.73	<i>Profils axiaux de température, des espèces CH_4, H_2O, CO_2, CO et OH calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	123
3.74	<i>Profils axiaux de température, des espèces CH_4, H_2O, CO_2, CO et OH calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	124
3.75	<i>Profils axiaux de température, des espèces CH_4, H_2O, CO_2, CO et OH calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme squelettique de la DRG, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	124
3.76	<i>Profils du CH_4 et du O_2 dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	126
3.77	<i>Profils de la température et CO_2 dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	126
3.78	<i>Profils du H_2O et du OH dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	127
3.79	<i>Profils du CO et du NO dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.</i>	127

Liste des tableaux

1.1	<i>Avantages et inconvénients des trois modes de combustions présentés [49].</i>	9
1.2	<i>Caractéristiques générales du biogaz.</i>	30
2.1	<i>Paramètres constants du modèle turbulence $k - \varepsilon$ standard.</i>	49
2.2	<i>Modèle chimique de Jones and Lindstedt [175], optimisé par Cuoci <i>et al.</i> [176]; unités de A (mol, cm³, sec); E (cal/mole)</i>	59
2.3	<i>Modèle chimique à deux étapes; unités de A (mol, cm³, sec); E (cal/mole)</i>	59
3.1	<i>Temps d'exécution moyens par itération.</i>	84
3.2	<i>Conditions aux limites de la flamme OXYFLAM-2 A</i>	94
3.3	<i>Conditions initiales et aux limites de la flamme D</i>	98
3.4	<i>Temps d'exécution moyens par itération en fonction du modèle de combustion.</i>	98
3.5	<i>Composition en volume molaire du Biogaz selon le type de substrat utilisé.</i>	119
3.6	<i>Composition en fraction massique des combustibles des flammes à jet simple de Biogaz.</i>	121
3.7	<i>Composition en fraction massique des combustibles des flammes pilotes de Biogaz.</i>	121

Résumé

En général, les mécanismes détaillés des réactions chimiques de combustion, demandent des temps de processeur encore élevés au cours des simulations, pour nos ordinateurs actuels. Pourtant, les gains en temps de calculs, tout en gardant la précision lors de la conception numérique de nouvelles chambres à combustion sont des défis majeurs. Afin d'accélérer le traitement de la cinétique chimique, cette thèse vient s'inscrire dans la contribution à l'amélioration d'une méthode de réduction des mécanismes. Dans ce travail, le modèle de réduction développé est appliqué à la modélisation de la combustion turbulente du méthane, puis du biogaz, proposé comme substituant du méthane (gaz naturel) dans le code "Computational Fluid Dynamics" (CFD), "Open Fields Operation And Manipulation" (OpenFOAM). La méthode mise à contribution, est un algorithme de réduction multi-étapes, appliqué au couplage des méthodes "Directed Relation Graph" (DRG) et "DRG-Aided Sensitivity Analysis" (DRGASA) en quatre étapes. Cette approche consiste à obtenir des mécanismes de réactions simplifiés et compacts ; c'est à dire taillés selon les conditions initiales et aux limites de la flamme. Trois flammes expérimentales ont été choisies à l'effet de valider les mécanismes simplifiés de la méthode de réduction, à savoir : la flamme DLR-A, la flamme D, toutes deux de Sandia et la flamme OXYFLAM-2 A de l'IFRF (International Flame Research Foundation). Le mécanisme de cinétique chimique détaillé, utilisé est celui du "Gas Research Institute" version 3.0 pour la combustion du gaz naturel, nommé GRI-Mech 3.0 (51 espèces et 325 réactions). En allant du GRI 3.0, la méthode de réduction développée, permet d'obtenir : (i) pour la flamme DLR-A, un mécanisme de type C_2 , de 21 espèces et 51 réactions, (ii) pour la flamme D, un mécanisme de type C_2 , de 20 espèces et 47 réactions et (iii) pour la flamme OXYFLAM-2 A un mécanisme de type C_2 , de 21 espèces et 39 réactions. Ainsi, le pourcentage de réduction est en moyenne de 79,14%. Le couplage entre la chimie et la turbulence est fait à l'aide des modèles de combustion tels que : "Partially Stired Reactor" (PaSR), "Eddy Dissipation Concept" (EDC) et "Steady Laminar Flamelet Model" (SLFM). Les modèles $k - \varepsilon$ et $P-1$ sont utilisés pour la prise en compte de la turbulence et du rayonnement. En outre, le modèle de turbulence LES (Smagorinsky) est testé dans un cas de la flamme D. Les performances des mécanismes chimiques avec différentes espèces et réactions élémentaires dérivés du GRI-Mech 3.0 sont évaluées et montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux. Leurs mises en œuvre lors des simulations permet des temps de calculs assez raisonnables. Une fois les mécanismes C_2 de la méthode multi-étape validés, leurs applications à la combustion turbulente des biogaz sont effectuées dans les configurations des flammes expérimentales. Ces biogaz constitués de CH_4 et de CO_2 à différentes proportions sont issus de la digestion anaérobie de la bouse de vache, des lisiers de mouton et des lisiers de porc. Au fur et à mesure que la proportion du CH_4 dans le biogaz diminue, cela entraîne une réduction du temps de séjour, du temps de mélange et de la vitesse de réaction du combustible lors de la combustion. On observe donc une réduction de la longueur de la flamme et une chute rapide de la température. En raison des températures un peu moins élevées par rapport à celles du gaz naturel, les flammes de biogaz riches en CO_2 , ont pour avantage de produire moins de polluants tels que le CO et le NO.

Mots clés : Code OpenFOAM, Combustion Turbulente, Mécanismes Squelettiques, Méthodes de Réduction, Modèles de Combustion.

Abstract

In general, nowadays, detailed mechanisms of chemical combustion reactions still require high processing times during simulations for computers. However, time saving in calculation, while keeping the precision during digital design of new combustion chambers is a major challenge. In order to accelerate the treatment of chemical kinetics, this thesis is part of the contribution to the improvement of a reduction mechanisms method. In this work, the reduction model developed is applied to the modeling of turbulent combustion of methane, then biogas, proposed as a substitute for natural gas in "Computational Fluid Dynamics" (CFD), "Open Fields Operation And Manipulation" (OpenFOAM) codes. The method used is a multi-stage reduction algorithm applied to the coupling of the "Directed Relation Graph" (DRG) and "DRG-Aided Sensitivity Analysis" (DRGASA) methods in four steps. This approach consists in obtaining simplified and compact reaction mechanisms ; that is, cut according to the initial conditions and to the limits of the flame. Three experimental flames were chosen to validate the simplified mechanisms of the reduction method, namely : the flames DLR-A, D from Sandia and OXYFLAM-2 A from the International Flame Research Foundation (IFRF). The detailed chemical kinetic mechanism used is that of the "Gas Research Institute" version 3.0 for the combustion of natural gas, called GRI-Mech 3.0 (51 species and 325 reactions). Going from GRI 3.0, the reduction method developed allow to obtain : (i) for the flame DLR-A, a type C₂ mechanism, of 21 species and 51 reactions, (ii) for the flame D, a C₂ type mechanism, 20 species and 47 reactions and (iii) for the flame OXYFLAM-2 A, a C₂ type mechanism, 21 species and 39 reactions. Thus, the average percentage of the reduction is 79.14%. Coupling between chemistry and turbulence is made using combustion models such as : "Partially Stired Reactor" (PaSR), "Eddy Dissipation Concept" (EDC) and "Steady Laminar Flamelet Model" (SLFM). The models $k - \epsilon$ and $P-1$ were used to take into account turbulence and radiation. The LES (Smagorinsky) turbulence model was tested for the case of flame D. The performances of the chemical mechanisms with different species and elementary reactions derived from GRI-Mech 3.0 are evaluated and show a good agreement with the experimental results. Their implementation during the simulations allows fairly reasonable calculation times. Once the C₂ mechanisms of the multi-stage method have been validated , their applications to the turbulent combustion of biogas are carried out in experimental flame configurations. These biogas, made up of CH₄ and CO₂ in different proportions, come from the anaerobic digestion of cow dung, sheep slurry and pig slurry. As the proportion of CH₄ in the biogas decreases, this leads to a reduction in the residence time, mixing time and reaction rate of the fuel during combustion. We therefore observe a reduction in the length of the flame and a rapid drop in temperature. Due to the slightly lower temperatures compared to those of natural gas, the CO₂-rich biogas flames have the advantage to produce few pollutants namely CO and NO.

Keywords : OpenFOAM Code, Turbulent Combustion, Skeletal Mechanisms, Reduction Methods, Combustion Models.

Introduction Générale

Introduction Générale

La question de la transition énergétique se pose de plus en plus depuis une décennie avec acuité, au vu des problèmes liés au changement climatique et à la question des énergies fossiles qui selon des sources tendent à s'épuiser. Dans ce contexte, les pays africains, dont la plupart ont un indice de développement humain et une industrialisation assez faible [1], doivent avec l'aide des politiques énergétiques appropriées, se positionner en prenant avantage. La plupart des pays africains ne sont pas soumis à la pression d'abandonner le charbon au profit d'autres sources d'énergie pour répondre à leurs besoins énergétiques. La transition énergétique de l'Afrique se heurte plutôt à deux autres défis importants : celui de la modernisation et celui de l'expansion. La modernisation consiste à exploiter l'important potentiel du continent en matière d'énergies renouvelables : biomasse, énergie éolienne, solaire et hydroélectrique. L'expansion quant à elle, consiste à élargir la diffusion de technologies adaptées pour répondre aux besoins énergétiques d'une population en pleine croissance. Il faut toutefois noter que les combustibles hydrocarbonés fossiles (notamment le gaz et le pétrole) restent les principales sources d'énergie de combustion. La combustion des hydrocarbures est une source majeure d'émissions de polluants et de gaz à effet de serre, tels que les NO_x , la suie, le CO, le CO_2 et les hydrocarbures non brûlés. Ainsi, leurs productivités et leurs modes de combustion nécessitent d'être améliorés. L'un des principaux objectifs de la recherche sur la combustion est donc d'améliorer le rendement énergétique et de réduire les émissions dans les dispositifs de combustion. Il revient donc aux pays en voie de développement de s'industrialiser non pas en excluant totalement les énergies hydrocarbonées, mais surtout en privilégiant et en développant des technologies visant à réduire les gaz à effet de serre et les polluants lors de leurs exploitations. En outre, le développement des énergies renouvelables (biomasse, solaire et éolienne) moins polluées, présentant un grand gisement et garantissant un développement durable, serait un atout pour l'Afrique en générale et le Cameroun en particulier.

La recherche expérimentale est actuellement la principale approche en matière de conception des systèmes de combustion (moteurs, chambres de combustion industrielle, ...). Cependant, compte tenu du coût élevé des études expérimentales, les simulations informatiques prédictives constituent une approche complémentaire pour faciliter et réduire le coût de la conception et de l'optimisation des systèmes de combustion. La combustion dans ces systèmes est multi-physique et multi-échelle par nature. Elle implique des couplages forts entre la cinétique chimique et la turbulence. Les simulations des systèmes de combustions industrielles et des moteurs avancés nécessitent donc des modèles efficaces et fiables qui peuvent rendre compte des processus physiques et chimiques entièrement couplés. Pour pouvoir simuler numériquement un système de combustion réel, divers modèles mathématiques sont nécessaires ; des modèles pour la thermodynamique, le transport moléculaire, le transfert de chaleur, le rayonnement, la chimie, la turbulence et la combustion. Dans les problèmes "Computational Fluid Dynamics" (CFD), la chimie de la combustion joue un rôle majeur et donc des modèles chimiques adéquats sont nécessaires compte tenu des coûts de calcul jouant un rôle important.

Bien que la puissance des ordinateurs et la recherche en dynamique des fluides numérique (CFD) aient connu des améliorations remarquables au cours des dernières décennies, la chimie détaillée des combustibles pratiques reste difficile à être utilisée dans la plupart des simulations CFD actuelles, alors qu'elle est impor-

tante pour la simulation de la combustion, en raison de sa grande précision et de son exhaustivité dans la prévision des comportements complexes des flammes et des phénomènes de combustion limite, tels que l'allumage et l'extinction. Ainsi, pour les besoins de la CFD, il est souhaitable que les mécanismes de réaction soient aussi précis que possible dans les limites des ressources informatiques disponibles. Plus précisément, si des mécanismes chimiques doivent être utilisés dans les simulations CFD, il peut s'agir de mécanismes détaillés, de mécanismes squelettiques ou de mécanismes réduits. Les mécanismes détaillés consistent en des réactions élémentaires qui sont généralement utilisés avec plus de précision pour la simulation de la combustion pré-mélangée et non pré-mélangée, dans de larges gammes de pression, température et stoechiométrie. En revanche, un mécanisme squelettique est, par définition, le plus petit mécanisme possible de réactions élémentaires qui, pour un problème donné, décrit suffisamment bien la chimie. Enfin, un mécanisme réduit consiste, par définition, non pas en des réactions élémentaires mais en des étapes de réaction globales dont les taux doivent être calculées d'une manière spéciale à spécifier.

D'autre part, du point de vue informatique, les modèles utilisant un mécanisme détaillé de réactions élémentaires sont les plus coûteux en temps CPU, car pour un problème de combustion donné, il n'y a pratiquement pas de limite supérieure au nombre de réactions élémentaires à prendre en compte autre que les limites imposées par les ressources informatiques disponibles. Puisque dans les applications pratiques les ressources informatiques sont, bien sûr, limitées, c'est le goulot d'étranglement pour l'utilisation de mécanismes détaillés de réactions élémentaires dans la simulation CFD pratique de problèmes réactifs.

L'objectif principal de cette thèse est de modéliser la combustion numérique en optimisant le temps de calcul du méthane pur et dilué à l'aide d'une cinétique réduite. Une fois que les mécanismes squelettiques sont dérivés du GRI 3.0, ils sont validés dans des configurations expérimentales de la combustion turbulente, de diffusion d'une part, telles que la flamme DLR-A de Sandia [2–11] et la flamme OxyFLAM-2 A de l'IFRF [12–14] et partiellement pré-mélangé d'autre part, telle que la flamme D de Sandia [15–18]. Cette modélisation à temps de calcul optimisé, est par la suite appliquée à la combustion des biogaz (issus des déjections animales), dans le but de comparer leur efficacité à celle du méthane dans les mêmes configurations et mêmes conditions.

Pour permettre des simulations numériques prédictives avec une chimie réaliste, les mécanismes détaillés peuvent être considérablement réduits sans perte significative de précision. Plusieurs méthodes conceptuelles sont employées de manière générale pour la réduction des espèces et des réactions élémentaires. Nous pouvons citer entre autres, les méthodes Computational Singular Perturbation (CSP) [19–24], "Reaction Diffusion Manifolds" (REDIM) [25, 26], "Intrinsic Low-Dimensional Manifold" (ILDIM) [27, 28], "Rate-Controlled Constrained-Equilibrium" (RCCE) [29–31] et la méthode "Directed Relation Graph" (DRG) et ses variantes qui font l'objet de cette étude [32–47] ; la liste est loin d'être exhaustive.

Lorsque le problème concernant l'optimisation de la cinétique chimie est résolu, la modélisation de la combustion turbulente est facilement envisageable. Il convient de définir ou de choisir également un modèle de turbulence intervenant dans le couplage chimie-turbulence qui convient à l'écoulement en permettant un temps de calcul raisonnable. Il en existe en général trois grands types : la "Reynolds-Averaged Navier-Stokes" (RANS), la "Large Eddy Simulation" (LES) et la "Direct Numerical Simulation" (DNS). Les modèles de combustion sont donc au cœur des simulations numériques puisqu'ils intègrent et prennent en compte à la fois les phénomènes de l'espace physique et de l'espace chimique. Leur conception prend en compte le mode de combustion (pré-mélangé ou non pré-mélangé) et le temps d'ignition ; soit la chimie est infiniment rapide, soit elle est non-infiniment rapide.

Au vu de ce qui précède, la modélisation numérique de la combustion turbulente des gaz en général et du méthane en occurrence a déjà fait l'objet de plusieurs travaux. C'est ce qui justifie l'intérêt de la modélisation de la combustion des biogaz ; qui est constitué en majorité du CH_4 et du CO_2 . Néanmoins, la présence du

CO₂ et des autres espèces minoritaires dans le biogaz impose quelques particularités dans sa modélisation par rapport au méthane ou au gaz naturel. Il constitue une source d'énergie renouvelable à fort potentiel au Cameroun. Il nécessite donc d'être caractérisé et la modélisation de sa combustion étudiée, afin d'évaluer ses capacités à substituer le gaz naturel dans les chambres de combustion réelles.

Ce travail propose une technique améliorée ; pour la réduction du mécanisme de cinétique de combustion des hydrocarbures, plus particulièrement du méthane (CH₄). Cette technique intègre 4 étapes des méthodes de réduction squelettique. Elle consiste à concevoir des mécanismes squelettiques dérivés du mécanisme détaillé GRI3.0-Mech, de manière à ce qu'ils soient adaptés aux conditions expérimentales du système de combustion choisi pour des simulations dans le code CFD OpenFOAM dans les limites des ressources informatiques disponibles. L'application de cette technique pour la conception des mécanismes destinés à la combustion des biogaz est le principal objectif de cette thèse.

Cette thèse vise à :

- Développer des compétences et aptitudes pour la maîtrise des simulations de la combustion turbulente des gaz ;
- Maîtriser quelques méthodes de cinétiques chimiques et modèles de combustion turbulente appropriés aux simulations de flammes ;
- Promouvoir la combustion industrielle (en générale turbulente), et même domestique des biogaz ;
- Proposer des techniques permettant une production énergétique moins polluante, tels la valorisation des biogaz.

La structure globale de cette thèse se présente sous forme de 3 chapitres encadrés par une introduction générale et une conclusion générale et les perspectives. Le chapitre 1 est réservé aux généralités et à la revue de la littérature. Le chapitre 2, quant à lui présente les équations de l'aérothermochimie, les modèles de réduction de la cinétique chimique, les modèles de turbulence et les modèles de combustion utilisés dans ces travaux. De plus, la description des configurations expérimentales à co-courant considérées dans ce travail, est présentée dans ce chapitre. Le chapitre 3 est consacré aux résultats des méthodes de réduction de la cinétique chimique, d'une part et celles des simulations CFD issus du code OpenFOAM d'autre part. Une application à la combustion des biogaz est effectuée et tous les résultats ici présentés sont analysés.

Chapitre 1

Chapitre 1

Synthèse Bibliographique : Généralités sur les Flammes, sur les Mécanismes Chimiques et sur les Biogaz

Introduction

La science de la combustion a connu depuis ces dernières années beaucoup d'avancées en ce qui concerne la modélisation de la combustion turbulente, la cinétique chimique et la turbulence. Dans ce chapitre, nous présentons l'état de l'art sur les modèles de combustion, les méthodes de réduction de la cinétique chimique, ainsi que sur la production, la valorisation et combustion des biogaz.

1.1 Les Modèles de Combustion Turbulente et les Modèles de Turbulence

1.1.1 Généralité sur les flammes turbulentes

Définition d'une flamme

La flamme, est une zone de réaction chimique supposée mince, qui sépare les gaz brûlés des gaz non brûlés. Elle est symbolisée visuellement par la luminosité de son rayonnement, la manifestation locale de phénomènes chimiques et physiques. Elle est définie également comme un écoulement d'espèces solides, liquides ou généralement gazeuses en cours de réaction chimique ; s'accompagnant le plus souvent d'un fort dégagement de chaleur [48]. Elle constitue donc un milieu réactionnel gazeux, hautement énergétique où se produit un ensemble de réactions chimiques élémentaires (combustion vive) décomposant les molécules des combustibles en espèces plus petites (espèces intermédiaires) qui se recombinent pour donner des produits plus stables (H_2O et CO_2 par exemple), un fort dégagement de chaleur et l'émission de rayonnements visibles. La flamme résulte d'un processus chimique qu'est la combustion définie par une réaction d'oxydo-réduction entre un combustible (carburant) et un comburant (oxydant).

La modélisation de la combustion turbulente nécessite d'abord une bonne compréhension des phénomènes physico-chimiques dans les régimes laminaires. En effet, la classification des différents types de flammes turbulentes s'appuie sur les propriétés de ces flammes dans le cas laminaire.

Pour la combustion gazeuse, il existe deux modes de combustion élémentaires [49] : à savoir, la combustion pré-mélangée et la combustion non pré-mélangée. Entre ces deux modes de combustion élémentaires se trouvent différents modes de combustion intermédiaires, comme le pré-mélange partiel ou la combustion stratifiée.

- **La combustion prémélangée** est un mode de combustion où le carburant et l'oxydant sont prémélangés avant d'atteindre le front de flamme. Ce mode est souvent utilisé en régime pauvre (le combustible est en quantité inférieure aux conditions stœchiométriques), permettant ainsi d'augmenter le rendement du système de combustion et de réduire la production d'oxydes d'azote ; polluant très nocif dont on veut limiter la production. En contrepartie, les flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser, nécessitant l'utilisation de dispositifs complexes d'accrochage de flamme.

- **La combustion non prémélangée**, est un mode de combustion où la carburant et l'oxydant sont injectés par deux courants différents, le front de flamme se positionnant à la rencontre des deux lignes de courant. Ce mode de combustion, qui est donc plus facile à maîtriser, a le désavantage de former plus de polluants, du fait des hautes températures atteintes dans le front de flamme.

-**La combustion partiellement prémélangée**, est un mode intermédiaire retrouvé fréquemment dans les applications industrielles. Pour des raisons de sécurité, l'oxydant et le carburant sont stockés séparément (l'oxydant est par ailleurs bien souvent pris dans l'environnement extérieur et n'est pas stocké par le système de combustion). L'oxydant et le carburant sont donc injectés par deux courants différents, en amont du front de flamme, et sont supposés se mélanger avant d'atteindre le front de flamme. Mais il arrive très fréquemment que le mélange ne soit pas parfait et que des hétérogénéités de mélange atteignent le front de flamme. Dans un autre sens, il est envisageable que les deux courants d'un système non prémélangé se mélangent avant d'atteindre le front de flamme. Ainsi le mode de combustion n'est plus non prémélangé mais partiellement prémélangé.

Tableau 1.1 – *Avantages et inconvénients des trois modes de combustions présentés [49].*

Mode de combustion	Avantages	Inconvénients
Prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre)	Instabilités de combustion, stockage du mélange
Non prémélangé	Stabilité de la flamme, stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Production d'oxydes d'azote
Partiellement prémélangé	Peu polluant (en régime pauvre), stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Instabilités de combustion, hétérogénéités de mélange

Après que le mode soit connu, l'étude de la combustion turbulente nécessite une caractérisation préalable détaillée de la turbulence du milieu dans lequel se propage la flamme. En effet, dans les dispositifs de combustion, l'exactitude et la précision des simulations numériques menées dans le cadre de l'étude de la combustion turbulente reposent sur une connaissance détaillée des statistiques turbulentes caractérisant l'écoulement où a lieu la combustion. La vitesse de combustion turbulente ou le taux de plissement par exemple dépendent de l'intensité turbulente et des échelles caractéristiques de la turbulence. La connaissance des spectres de la turbulence permet également de définir la gamme des échelles turbulentes pouvant affecter le front de flamme.

Les flammes turbulentes de prémélange

À partir d'une approche descriptive considérant les phénomènes de turbulence dans les flammes, la combustion prémélangée en écoulement turbulent peut être résumée à l'interaction entre un front de flamme, caractérisé par son épaisseur δ_L et sa vitesse de propagation S_L , et un ensemble de tourbillons représentant les structures turbulentes, caractérisées par une taille comprise entre l'échelle de Kolmogorov η et une échelle intégrale de turbulence l et une vitesse circonférentielle incluse entre la vitesse de Kolmogorov u'_η et la moyenne quadratique des fluctuations instantanées de vitesses u' . À partir de ces trois couples des échelles

de longueurs et de vitesses, on peut déduire trois échelles temporelles ; une pour la flamme et deux pour la turbulence [50] :

- un temps caractéristique des réactions chimique : $\tau_c = \delta_L/S_L$;
- un temps caractéristique de l'évolution des gros tourbillons : $\tau_t = l_t/u'_t$;
- un temps caractéristique de l'évolution des petits tourbillons : $\tau_k = \eta/u'_\eta$.

Deux nombres adimensionnels seront définis en comparant des ordres de grandeur de l'échelle temporelle de la flamme avec les deux échelles de la turbulence. Ces nombres sont, le nombre de Damköhler et le nombre de Karlovitz. Pour connaître ces nombres, la première étape est de définir un nombre de Reynolds comparant le transport turbulent aux forces visqueuses :

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{\nu}. \quad (1.1)$$

En se souvenant de la vitesse et de l'épaisseur de la flamme laminaire de prémélange, nous pouvons définir le nombre de Reynolds turbulent comme suit :

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{S_L \delta}. \quad (1.2)$$

Nous pouvons donc définir le nombre de Damköhler (Da), comme le rapport entre le temps caractéristique des gros tourbillons et le temps caractéristique des réactions chimiques :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t S_L}{\delta u'_t}. \quad (1.3)$$

Le nombre de Karlovitz (Ka), quant à lui, peut être défini comme le rapport entre un temps caractéristique des réactions chimiques et le temps caractéristique des petits tourbillons (échelles de Kolmogorov) :

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \left(\frac{\tau_k}{\tau_c} \right)^{-1} = \frac{\delta u'_\eta}{\eta S_L}. \quad (1.4)$$

Nous pouvons donc relier les échelles intégrales aux échelles de Kolmogorov :

$$l_t = Re_t^{3/4} \eta \quad \text{et} \quad u'_t = Re_t^{1/4} u'_\eta. \quad (1.5)$$

Le nombre de Karlovitz Ka peut aussi s'écrire :

$$Ka = \left(\frac{\delta}{\eta} \right)^2 = \left(\frac{u'_\eta}{S_L} \right)^2. \quad (1.6)$$

On a donc $Ka = (Da)^{-1}$; lorsque le nombre Damköhler est défini avec les échelles de Kolmogorov à la place des échelles intégrales de la turbulence. L'intérêt du nombre de Karlovitz est de quantifier les interactions possibles entre les plus petits tourbillons et la flamme elle-même. Plusieurs cas sont possibles [51] :

1.) Cas du régime des flammelettes, $Ka < 1$ et $Re_L > 1$;

Lorsque les phénomènes chimiques sont très rapides devant les phénomènes d'écoulement turbulent, le front de flamme s'enroule autour de ces structures sans être modifié intérieurement. La combustion se fait alors sous la forme de fronts de flammes convectés par les structures de l'écoulement. Ces fines interfaces conservent localement les caractéristiques de la flamme laminaire et sont appelées «flammelettes».

Dans le cas de flammes turbulentes de type « plissées » ($u'/S_L < 1$), les fluctuations de vitesse u' ne peuvent pas plisser suffisamment le front de flamme pour provoquer des interactions entre les flammelettes.

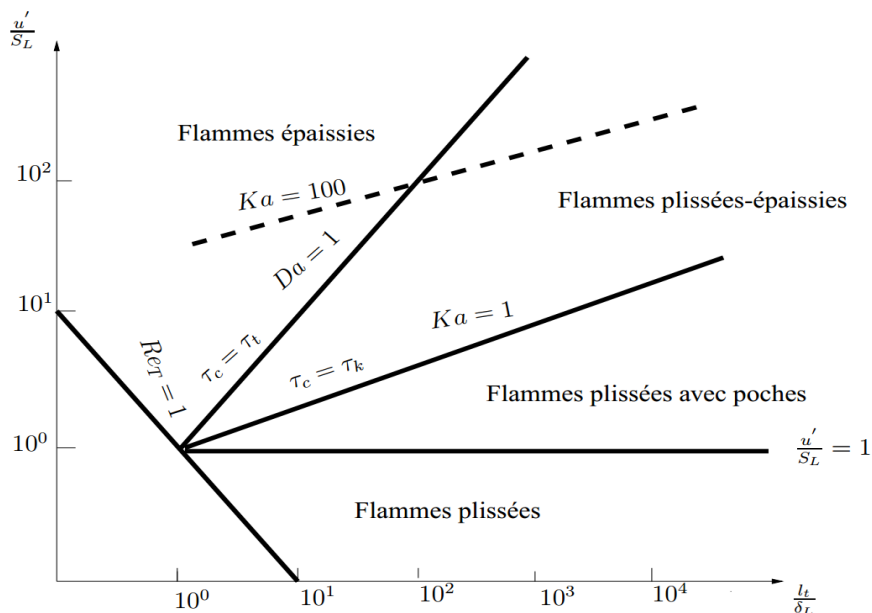


FIGURE 1.1 – Régimes des flammes de prémélange turbulentes (diagramme de Borghi) [48].

2.) Cas du régime des flammes plissées épaissies, $Da > 1$ et $Ka > 1$;

Lorsque l'échelle de Kolmogorov, la plus petite de l'écoulement turbulent, est inférieure à l'épaisseur du front de flamme laminaire δ_L , la structure interne de la flamme commence à être modifiée, des interactions entre les flammelettes voisines se produisent très fréquemment puisque leur rayon de courbure devient du même ordre de grandeur que δ_L . Dans le cas où elles fusionnent, l'épaisseur du front de flamme augmente localement [52]. Les flammes de ce type sont des flammes turbulentes dites « plissées épaissies ».

3.) Cas du régime des flammes épaissies, $Da < 1$ et $Re_L > 1$:

Dans le cas où la chimie est relativement lente par rapport à la turbulence (c'est-à-dire quand le temps caractéristique de la réaction chimique est plus petit que le temps caractéristique de la turbulence), le front de flamme devient alors non courbé mais très épais. Cette flamme est le résultat de très nombreux repliements du front de flamme. La flamme est dite « épaissie », la notion d'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés n'est plus adaptée à ce régime où il est plus approprié de définir une zone de réaction.

Les flammes turbulentes de diffusion

Dans le cas d'une flamme de diffusion, les notions de vitesse et d'épaisseur de flammes non pas de sens physiques ; en effet, plusieurs vitesses de flammes de diffusion peuvent être obtenues dans la même configuration expérimentale [48].

- Lorsque la turbulence n'est pas trop forte, la structure de la flamme de diffusion est celle d'une flamme plissée. Elle est constituée donc d'une longue flammelette continuellement plissée, étirée et comprimée alternativement par les mouvements turbulents,

- Lorsque la turbulence devient assez forte, deux phénomènes peuvent se produire :

- D'une part la turbulence peut étirer la flammelette de telle façon que celle-ci s'éteigne à l'endroit où elle est suffisamment étirée. On rencontrera plusieurs flammelettes séparées par la zone d'extinction, qui apparaît lorsque $\frac{\tau_c}{\tau_k} > 1$.

- D'autre part, une turbulence trop forte va provoquer aussi des interactions entre deux portions de flammelettes. Les grandes échelles feront interagir deux portions assez éloignées et cela formera des boucles de flammelette.

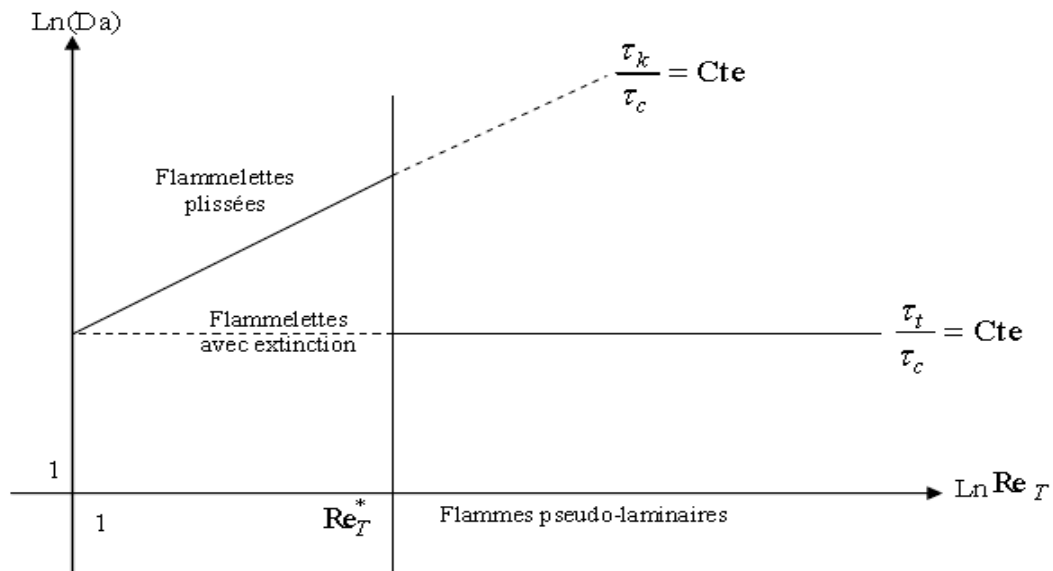


FIGURE 1.2 – Les différents structures d’une flamme de diffusion [53].

- Pour $Re_t = 1$, on ne s’intéresse qu’au domaine vraiment turbulent pour lequel $Re_t > 1$ Avec Re_t^* limite du domaine des flammelettes.
- Pour $Re_t > 1$, on a le domaine des flammelettes à extinction locales (propre à la flammelette).
- Pour $Re_t > Re_t^*$, on a le domaine où il n’est plus possible de distinguer des flammelettes au sens propres du terme, c’est-à-dire qui ne soient pas modifiées intérieurement par la turbulence. Si $\tau_K < \tau_c$, on a à faire une extinction et si $\tau_K > \tau_c$, on a à faire à une combustion sans extinction [53].
- Si $\tau_c \gg \tau_t$, l’on considère maintenant le domaine où les fluctuations turbulentes de concentration et de température, dans la flamme sont très petites (dues à la petitesse de τ_t). Cela veut dire qu’elles ont le temps de se dissiper avant qu’aucun phénomène chimique notable ne se produise (bien sur, cela n’implique pas que les fluctuations de vitesse soient faibles, puisqu’elles sont constamment renouvelées, par hypothèse). Si de plus Re_t est élevé, la diffusion est assurée de façon très efficace puisque le coefficient effectif de diffusion turbulente est proportionnel à Re_t , par définition. On est alors en présence d’une flamme turbulente qu’on pourrait appeler pseudo-laminaire.

1.1.2 Cinétique chimique

Le processus de combustion correspond à une succession complexe de réactions chimiques élémentaires. En pratique, le schéma réactionnel complexe est remplacé par une réaction globale dont l’équation est de la forme :

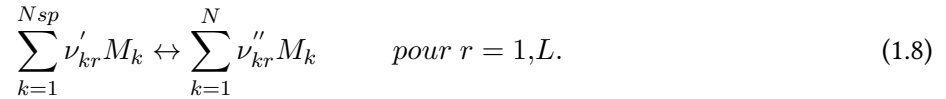


où A est le combustible, B le comburant, a et b sont les coefficients stoechiométriques de la réaction, P représente les produits de la combustion et Q , la chaleur dégagée au cours de la réaction.

D’un point de vue de la cinétique chimique, la combustion se définit comme l’évolution irréversible d’un

mélange réactif vers un état d'équilibre [54]. Ainsi, l'équilibre chimique est défini par l'état final du processus réactionnel et la composition du mélange réactif est alors défini par les lois de la thermodynamique. Les processus d'une réaction chimique peuvent être représentés par une équation globale faisant intervenir les réactifs et les produits de la réaction. Cette équation globale ne donne en fait qu'un bilan de matière, ne décrit pas les réactions élémentaires qui ont effectivement lieu de manière très rapide faisant intervenir un ensemble d'espèces, dites minoritaires ou majoritaires. Ces espèces chimiques apparaissent ou disparaissent suivant les conditions de température et de pression de l'état d'équilibre.

Considérons un système chimique de N_{sp} espèces qui réagissent dans L réactions.



Où M_k est le symbole chimique de l'espèce k , ν'_{kr} et ν''_{kr} sont les coefficients stoechiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction r . En traduisant le coefficient stoechiométrique net $\nu_{kr} = \nu''_{kr} - \nu'_{kr}$, la conservation de la masse durant la réaction r , implique la relation :

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{kr} W_k = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{kr} W_k \quad \text{soit} \quad \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu_{kr} W_k = 0 \quad , \quad r = 1, L. \quad (1.9)$$

Le taux de réaction massique global $\dot{\omega}_k$ est la somme des taux $\dot{\omega}_{kr}$ produit par les L réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{r=1}^L \dot{\omega}_{kr} = W_k \sum_{r=1}^L \nu_{kr} Q_r \quad \text{Avec} \quad Q_r = \frac{\dot{\omega}_{kr}}{W_k \nu_{kr}}. \quad (1.10)$$

Où Q_r est le taux de progression de la réaction r , il est donné par :

$$Q_r = K_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{\nu'_{kr}} - K_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} \left(\frac{\rho Y_k}{M_k} \right)^{\nu''_{kr}}, \quad (1.11)$$

K_{fr} et K_{br} sont les constantes de réaction *forward* (direct) et *backward* (inverse) de la réaction r . La constante K_{br} s'écrit comme le quotient entre K_{fr} et la constante d'équilibre [55]. La constante K_{fr} est généralement modélisée par une loi d'Arrhenius :

$$K_{fr} = A_{fr} T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = A_{fr} T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right). \quad (1.12)$$

La connaissance de taux d'avancement individuel Q_r de chaque réaction nécessite la connaissance de la constante A_{fr} , l'exposant de la température β_r et l'énergie d'activation E_a , (ou la température d'activation $T_a = E_a/R$) qui représente la quantité d'énergie à apporter au système considéré pour que les espèces puissent réagir de façon significative. Avant d'identifier ces constantes, un autre défi est l'identification des espèces et des réactions à inclure dans le mécanisme réactionnel.

Il existe plusieurs types de mécanismes réactionnels représentés à différents niveaux de complexité, allant d'un mécanisme détaillé comprenant parfois plus d'une centaine d'espèces, à une simple réaction globale. Par ordre de complexité décroissante, on trouve [56] :

- Les mécanismes détaillés (au-delà de 200 réactions et une soixantaine d'espèces) ;
- Les mécanismes courts squelettiques (moins de 50 réactions et une vingtaine d'espèces) ;
- Les mécanismes réduits ou globaux (moins de 10 réactions et environ 4 ou 5 espèces).

1.1.3 Les Modèles de Combustion

Le calcul des termes sources, chimique, apparaissant dans l'équation de transport des espèces, est au centre des préoccupations de la modélisation en combustion turbulente. Les taux de réaction chimique, basés sur la loi d'Arrhenius, sont non-linéaires. Les modèles de combustion turbulente sont alors nécessaires pour fournir une fermeture pour les termes de la source chimique par approches RANS et LES.

Le terme source chimique moyen $\tilde{\omega}$ fortement non-linéaire due à la fluctuation des températures et des espèces, ne peut être déterminé par la seule connaissance des champs moyens. En effet, le taux de réaction donné par la cinétique chimique est une fonction non linéaire de plusieurs variables (température, fraction massique, densité) ; il est admis que :

$$\tilde{\omega}(\rho, Y_k, T) \neq \dot{\omega}(\tilde{\rho}, \tilde{Y}_k, \tilde{T}). \quad (1.13)$$

Aussi bien en combustion prémélangée qu'en combustion non-prémélangée, il existe de nombreuses approches pour exprimer le terme source moyenné $\tilde{\omega}(\rho, \underline{Y}, T)$; où $\underline{Y} = (Y_1, \dots, Y_{N_{sp}})$ est le vecteur des fractions massiques des N_{sp} espèces considérées.

Il existe deux grandes familles de modèles de combustion turbulente :

- Les modèles de combustion de chimie infiniment rapide,
- Les modèles de combustion de chimie non-infiniment rapide.

Dans la modélisation de la combustion, un large éventail des échelles de temps turbulentes et chimiques est en jeu.

► Échelles de temps

Les processus chimiques se produisent au niveau moléculaire. Pour le champ d'écoulement turbulent, une échelle de temps caractéristique peut être définie comme le rapport entre la longueur caractéristique l_0 et la variance de la vitesse,

$$\tau_{flow} \equiv \frac{l_0}{\overline{u'^2}}. \quad (1.14)$$

Pour les flammes laminaires prémélangées, un temps caractéristique pour les processus chimiques peut être décrit avec le rapport de l'épaisseur de la flamme δ_L et une vitesse du front de flamme S_L ,

$$\tau_{chem} \equiv \frac{\delta_L}{S_L}. \quad (1.15)$$

En tenant compte des deux temps caractéristiques, on peut obtenir un taux non dimensionnel de la turbulence et de l'échelle de temps chimique : le nombre de Damköhler. Il caractérise le type de combustion allant d'un réacteur parfaitement agité jusqu'aux flammes ridées,

$$Da = \frac{\tau_{flow}}{\tau_{chem}}. \quad (1.16)$$

Pour la modélisation de la combustion, on utilise généralement une échelle de temps turbulente basée sur le rapport entre l'énergie cinétique et son taux de dissipation,

$$\tau_t = C_t \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}}. \quad (1.17)$$

La constante C_t est généralement fixée à un.

Les échelles de temps physiques pour le mélange turbulent sont déterminées par les conditions d'écoulement à l'entrée et la géométrie du dispositif concerné. On peut observer que pour la combustion d'hydrogène par exemple, les échelles de temps de mélange turbulent pour des appareils pratiques comme les turbines à gaz, les brûleurs industriels ou domestiques ainsi que les configurations de laboratoire sont plus grandes que les échelles de temps de la chimie rapide. Cela permet, dans la modélisation de la combustion du méthane, de simplifier la description de la chimie sans perdre des informations importantes et de réduire les coûts de calcul : La combustion du méthane peut être décrite dans la plupart des cas par son état d'équilibre chimique, ce qui correspond à des réactions infiniment rapides.

▷ Les modèles de combustion de chimie infiniment rapide

Dans l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide, c'est à dire du mélange à l'équilibre, il est possible d'exprimer les propriétés thermochimiques de la flamme (composition et mélange) en fonction de la fraction de mélange Z uniquement : $\Phi = \Phi(Z)$. De la même manière, la PDF $P(Y_k, T)$ requise pour modéliser les interactions chimie/turbulence peut s'écrire sous la forme $P(Z)$. L'équation de fermeture pour les variables filtrées $\tilde{\Phi}(Z)$ s'écrit alors :

$$\tilde{\Phi}(Z) = \int \Phi(Z)P(Z)dZ. \quad (1.18)$$

- Le modèle de Burke-Schumann

L'approximation de Burke-Schumann est une représentation simpliste d'une flamme de diffusion laminaire, considérant que le temps caractéristique de la diffusion est le temps limitant. C'est un concept fondamental introduit par Burke et Schumann en 1928 pour la représentation de la combustion dans l'espace des fractions de mélange [57].

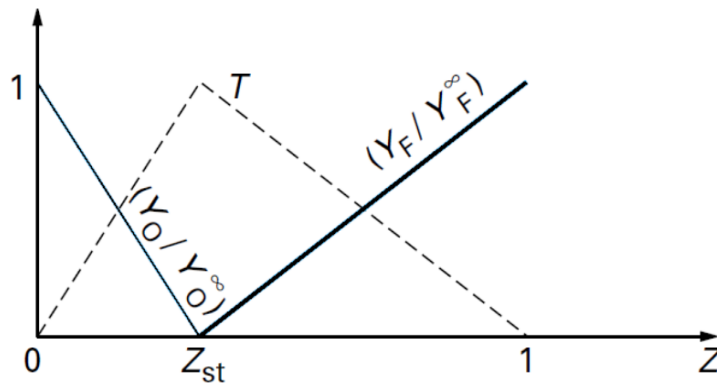


FIGURE 1.3 – Diagramme en Z de Burke-Schumann représentant la structure d'une flamme de diffusion dans le cas d'une réaction infiniment rapide et irréversible [58]

La fraction de mélange comme variable clé est définie comme un scalaire conservé décrivant l'état du mélange avec des valeurs 0 et 1 correspondant respectivement à l'air pur et au carburant pur. La fraction de mélange stœchiométrique correspond à la valeur où le combustible et l'oxydant seraient totalement consommés. En supposant une chimie infiniment rapide selon laquelle $Y = Y(Z)$, le mélange brûlé forme des quantités de produits qui sont égales le long des lignes dans l'espace de la fraction de mélange avec le maximum à la stœchiométrie. Ce concept de "mélange est brûlé" donne la limite de "Burke-Schuman". Elle se caractérise par des définitions linéaires des fractions massiques Y_k et de la température T selon la fraction de mélange Z , avec des pentes différentes selon le lieu étudié dans la zone de réaction. Le tracé des compositions et de la température selon Z est représenté sur la Figure.1.3. La flamme de Burke-Schuman trouve toujours son application

et son amélioration dans la recherche en combustion et continue d'inspirer des récents travaux [59,60].

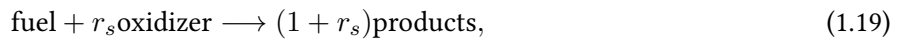
- Eddy Break Up

Le modèle "Eddy Break Up" (EBU) standard et modifié, s'applique également au cas limite de la chimie très rapide. Dans ce cas limite, la zone de réaction est décrite comme un mélange de régions brûlées et non brûlées pures [61]. La formulation tente de décrire le taux de réaction, qui représente la décomposition des domaines de gaz non brûlé en fragments plus petits. Les fragments sont en contact étroit avec les gaz brûlés chauds et réagissent donc presque immédiatement. Par conséquent, le modèle de l'EBU pourrait être interprété comme un cas limite à l'intérieur de la méthode dite de la PDF présumée, proposée pour la première fois par Mao et Toor [62]. Le cas limite représenté par le modèle de l'EBU serait alors cohérent avec une fonction de densité de probabilité dans laquelle seuls deux pics sont non nuls [63]. Ces pics correspondent aux cas dans lesquels Y_α est égal à 0 ou Y^0_α , la fraction de masse initiale.

Le modèle modifié de l'EBU étend le modèle standard en tenant compte de la distinction entre les mouvements des flammes et l'écoulement turbulent. Il a été démontré par Borghi (1988) [63] que la vitesse moyenne de réaction dépend fortement du rapport entre l'énergie cinétique turbulente k et la vitesse laminaire de la flamme S_L lorsque $k^{1/2}$ est de l'ordre de S_L , c'est-à-dire lorsque la vitesse de réaction est contrôlée non seulement par le mélange de turbulences (par rapport à k), mais aussi par les propriétés de la flamme (par rapport à S_L). C'est la base du modèle modifié, dans lequel la dépendance correspondante vis-à-vis du $k^{1/2}/S_L$ a été prise en compte.

- Les modèles de combustion Eddy Dissipation (EDM et EDC)

Le modèle "Eddy Dissipation Model" (EDM), introduit par Magnussen en 1976, est un exemple d'utilisation de l'échelle de temps turbulente comme valeur de détermination du taux de réaction [64]. Son utilisation s'est répandue dans les applications industrielles. Le modèle de combustion est basé sur la réaction en une seule étape :



où r_s est le coefficient stoechiométrique de la réaction en une étape. L'hypothèse de base de ce modèle largement utilisé est une chimie rapide, irréversible et en une étape. En raison de l'hypothèse d'une chimie rapide, la vitesse de combustion est déterminée par le processus de mélange turbulent tel que caractérisé par la fréquence de mélange turbulent $\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$ et par l'ingrédient limitant nécessaire à la réaction, soit le combustible, soit l'oxydant, soit la chaleur. Le terme de source chimique pour l'équation de transport a alors la forme suivante :

$$\bar{\omega}_f = -A\tilde{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \min \left\{ \tilde{Y}_f, \frac{\tilde{Y}_0}{r_f}, B \frac{\tilde{Y}_p}{1 + r_f} \right\}. \quad (1.20)$$

En 1981, Magnussen [65] par extension du modèle EDM introduit le modèle "Eddy Dissipation Concept" (EDC). Il est basé sur le découpage de l'écoulement en deux zones distinctes : une zone dissipative ou de micro-mélange, notée (*), où les réactions ont lieu, et une zone environnante, notée (0). En introduisant un facteur γ^* représentant la fraction volumique des structures fines et réactives, le terme source moyenné, $\tilde{\omega}_k(\bar{\rho}, T, Y_k)$, peut s'écrire :

$$\tilde{\omega}_k(\bar{\rho}, Y_k, T) = \gamma^* \dot{\omega}_k(\bar{\rho}, Y_k^*, T^*) + (1 - \gamma^*) \dot{\omega}_k(\bar{\rho}, Y_k^0, T^0). \quad (1.21)$$

Ce modèle a l'avantage d'être plus précis en prenant en compte un mécanisme à plusieurs réactions, par rapport au modèle EDM qui ne considère qu'une seule réaction globale.

▷ Les modèles de combustion de chimie non-infiniment rapide

Modèle "Partially Stirred Reactor" (PaSR)

Proposé par Chomiak [66], le modèle PaSR (Partially Stirred Reactor) se présente comme alternative au modèle EDC par extension de ce dernier. Plusieurs études utilisant différentes formulations du modèle PaSR [8, 11, 67–69], présentent de bons, voir des meilleurs résultats en termes de prédiction des températures et des concentrations des principales espèces, obtenus par approches RANS et LES. Dans le modèle du réacteur partiellement agité (PaSR), chaque cellule de calcul est divisée en deux régions : une zone de réaction et une zone de non-réaction. La vitesse de réaction moyenne (ou filtrée) de la cellule qui est fournie à l'équation de transport des espèces, est obtenue sur la base d'un échange de masse entre les deux régions et est exprimée comme suit :

$$\tilde{\omega}_k = \kappa \frac{\bar{\rho}(Y_k^* - Y_k^0)}{\tau^*}, \quad (1.22)$$

où $\bar{\rho}$ est la densité moyenne de Reynolds, Y_k^0 et Y_k^* sont les *i-mes* fractions de masse des espèces dans la région non réactive et dans la zone réactive, respectivement, et τ^* représente le temps de résidence dans la structure réactive. Le paramètre κ est la fraction volumique de la zone réactive et fournit donc l'état partiellement agité. Ce modèle constitue le principale modèle de combustion utilisé dans ce travail et sera présenté plus en détaille au Chapitre 2.

- Le Modèle des flammelles

Le concept de flammelle, introduit par Peters [70], est basé sur l'idée de l'existence locale de structures de flammes laminaires, appelées flamelets, telles qu'elles se produisent dans une flamme laminaire à contre-courant. Elle est basée sur la vision d'une flamme turbulente, comme un ensemble de nombreuses flammes à diffusion laminaire, généralement appelées "flamelets". Aujourd'hui, il existe plusieurs extensions de l'approche de la flammelle, prenant en compte des effets qui sont négligés dans la formulation fondamentale. Des détails peuvent être trouvés dans Peters [71], et Poinso et Veynante [55]. Dans le concept des "flammelettes", les processus de diffusion de la combustion turbulente et la chimie sont couplés. Dans le cas du modèle "steady laminar flamelet model" (SLFM), chaque flamme peut être décrite en termes de fraction du mélange et de taux de dissipation scalaire ou de taux de déformation respectivement. Dans un pré-traitement de la flamme laminaire, les calculs basés sur la diffusion laminaire à jet opposé sont effectués en utilisant une chimie détaillée et stockés dans des bibliothèques (voir par exemple [72, 73]). Ce modèle a été développé pour les nombres élevés de Damköhler. Il est également utilisable au-delà de cette restriction ; la région doit être déterminée. Pour intégrer des effets tels que l'extinction locale et le rallumage, "transient laminar flamelet models", TLFM, ont été développés par Pitsch [4]. Ils comprennent des paramètres caractéristiques supplémentaires comme la variable de progression de la réaction et un temps caractéristique, basé sur l'énergie cinétique k et le taux de dissipation ε . Pour tenir compte des fluctuations turbulentes, des PDF présumés sont utilisés (des exemples peuvent être trouvés dans [17, 74]).

Ainsi donc, dans le modèle des flammelles la structure de la flamme turbulente est assimilée localement à une flammelle laminaire dépendante d'une ou plusieurs variables caractéristiques. Les grandeurs thermo-chimiques instantanées de ces flammelles $\Phi = Y_k, \omega_k, T, \dots$ sont préalablement calculées puis stockées dans une table chimique. Cette dernière doit ensuite être couplée à une PDF présumée pour que le micro mélange soit modélisé. Cet approche PDF étant donc couplée à une méthode de chimie tabulée, permettant de s'affranchir du transport des fractions massiques Y_k dans le code CFD utilisé [75].

- Les Modèles Lagrangiens

Ils consistent à calculer les taux de réaction moyens $\tilde{\omega}_{Y_k}$ apparaissant dans les équations moyennées eulériennes de bilan d'espèces Y_k , en suivant l'évolution instantanée des particules fluides réactives ; tel que décrit par le formalisme lagrangien en mécanique des fluides.

Les équations permettant de suivre l'évolution des particules découlent donc de l'écriture de l'équation d'évolution lagrangienne pour une espèce réactive Y_k [76] :

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{d}{dx_k} \left(D_{Y_k} \frac{dY_k}{dx_k} \right) + \dot{\omega}_{Y_k}. \quad (1.23)$$

Les travaux développés par Villermaux [77] permettent la modélisation des termes de diffusion par échange avec la moyenne : modèle I.E.M (Intèraction par Échange avec la Moyenne). Ce modèle interprète la diffusion comme un échange avec la moyenne \tilde{Y}_k qui serait la résultante de toutes les particules de fluides au voisinage de la particule considérée. Il est donc interprété par l'équation suivante :

$$\frac{d}{dx_k} \left(D_{Y_k} \frac{dY_k}{dx_k} \right) = \frac{\tilde{Y}_k - Y_k}{\tau_{ex}}, \quad (1.24)$$

où τ_{ex} représente le temps caractéristique d'échange pour l'espèce Y_k .

Une approche de ces modèles s'appuyant sur la méthode P.E.U.L (Probabiliste EULérienne Lagrangienne) de Borghi [63,78] est capable de décrire des mélanges ayant partiellement réagi. Ceci en incorporant trois états différents dans l'espace des fractions de mélange, qui sont : l'équilibre chimique du mélange ayant entièrement réagi, une ligne de mélange sans réaction et une ligne de Lagrange, incluant les états ayant partiellement réagi. Ainsi, le taux de réaction moyen pour les différentes trajectoires Lagrangiennes est donné par :

$$\tilde{\omega}_i^{L_j} = \int_0^1 \dot{\omega} P(\phi) d\phi. \quad (1.25)$$

Il s'en suit donc que le taux moyen eulérien sera la moyenne des taux de réaction lagrangiens :

$$\tilde{\omega}_i = \sum_{j=1}^{N_{sp}} \gamma_j \tilde{\omega}_i^{L_j}, \quad (1.26)$$

où γ_j est la probabilité de distribution des taux de réaction moyens $\tilde{\omega}_i^{L_j}$, et représente également les coefficients de pondération.

Vervisch [78] montre que le modèle (P.E.U.L) simule bien les effets d'extinctions partielles et de réallumages dans les flammes de diffusion turbulentes hors équilibre chimique. Bien qu'il soit difficile à mettre en œuvre pour des mécanismes cinétiques à plusieurs espèces, car la technique permettant d'optimiser les coefficients de pondération γ_j exige beaucoup de temps de calcul.

L'utilisation du modèle IEM, a permis d'établir un autre modèle approché, lorsque les réactions de combustion sont supposées "brusques". Il s'agit de notre modèle d'étude, le modèle MIL (Modèle Intermittent Lagrangien). C'est un modèle basé sur la connaissance de la fraction de mélange, ϕ , et de la variable d'avancement, Y d'une particule fluide. Le terme source moyen est déterminé par une PDF $P(\phi, Y)$ à présumer.

Après sa naissance par Borghi [79, 80], MIL a subi plusieurs avancés ; notamment en 1994 par Obounou [76], où l'introduction de la chimie détaillée (complexe) permet la prédiction des zones d'extinction partielle puis des zones de réallumage. En 1997, Fallot *et al.* [81] appliqua MIL pour une flamme turbulente non

prémélangée en étudiant l'effet de stabilisation à la sortie d'un bruleur avec obstacle. Izard en 2009 [82] l'a implanté dans un code de calcul Navier-Stokes tridimensionnel compressible et réactif, dans le cadre de ses travaux sur la contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides, dans une chambre de combustion de type scramjet. En 2011, les travaux de Mouangué [48] ce sont consacrés à l'amélioration du modèle. La validation de la nouvelle version (MIL modifié) est faite par comparaison aux versions antérieures du modèle MIL. Il en résulte que les simulations avec le modèle amélioré sont en meilleur accord avec les mesures expérimentales d'une flamme de référence connue sous le nom de "flamme de Cabra". Très récemment, Gnenedem *et al.* [10] ont couplé le modèle MIL à une équation de transport du taux de dissipation du scalaire en appliquant le délais d'ignition aux mécanismes, détaillé du GRI 3.0, squelettique de Yang et Pope [83] et à un autre mécanisme réduit par Awakem *et al.* [8] à l'aide de la méthode CSP.

En invoquant l'hypothèse de chimie brusque, la variable d'avance des espèces est donnée par $Y = Y(\phi)$. En supposant égaux les temps caractéristiques des espèces et du mélange, on $\tau = \tau_Y = \tau_\phi$ et en considérant les temps d'ignition τ_{ig} , qui sera calculé à l'aide d'une table de délais, le taux de production moyen s'exprimera comme suit :

$$\tilde{\omega}_Y(\phi) = \tilde{\omega}_Y(\phi, \tau) = \int_0^1 \int_{\tau_{ig}}^\infty \dot{\omega}(\phi, \tau) \tilde{P}(\phi, \tau) d\phi d\tau, \tag{1.27}$$

avec
$$\dot{\omega}_Y(\phi, \tau) = \frac{1}{\tau} \left[\frac{dY}{d\phi} (\tilde{\phi} - \phi) - (\tilde{Y} - Y) \right],$$

$\tilde{P}(\phi, \tau)$, est déterminé par PDF présumer suivant l'hypothèse d'une décorrélation statistique entre les ϕ et τ telle que : $P(\phi, \tau) = P(\phi)P_\tau(\tau)$.

La Figure 1.4 représente les trajectoires dans l'espace des compositions. Le taux de réaction est calculée suivant chaque branche. Le point A et le point B de la figure représentent respectivement l'entrée de l'oxydant et celui du fuel.

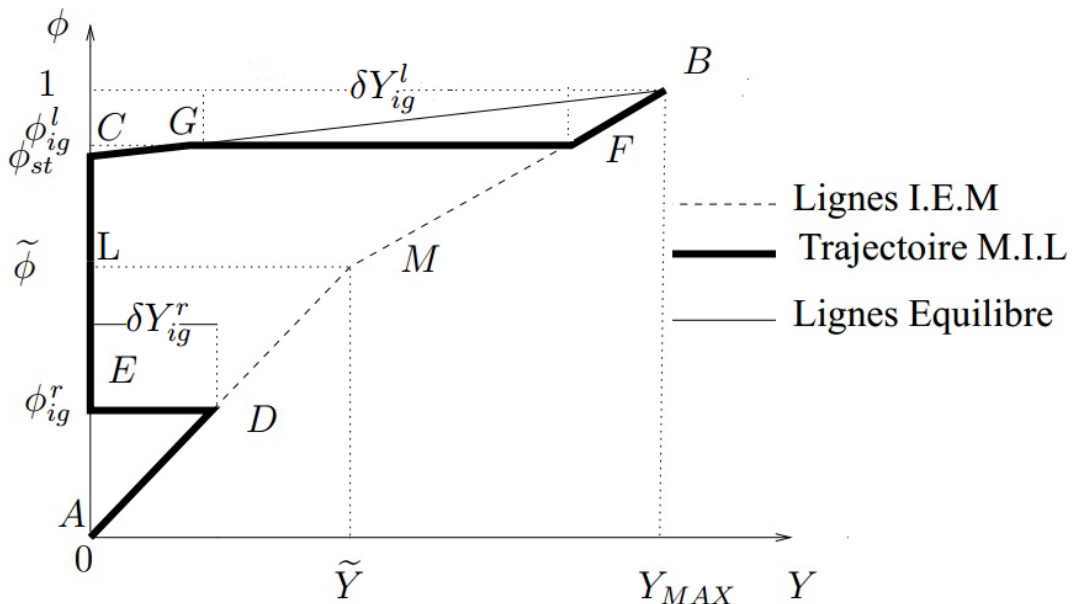


FIGURE 1.4 – Trajectoire des particules fluides dans l'espace des phases (ϕ, Y) pour une flamme de diffusion. [48]

L'hypothèse de chimie brusque permet aux particules de brûler après un certain temps, quittant ainsi de la branche de mélange par un saut pour arriver sur la branche d'équilibre.

Les particules allant du fuel pur en B et de l'oxydant en A, se mélangent et suivent la trajectoire IEM. Après le délais d'ignition, ils quittent par un saut cette trajectoire en F et D respectivement, pour s'inflammer

de manière infiniment brusque jusqu'à G et E respectivement, à l'issue desquelles, ils entrent dans un état d'équilibre. Ainsi, nous avons :

- [BF] et [AD] représentant les branches de mélange ;
- [FG] et [DE] représentant les branches d'inflammation ;
- [GL] et [EL] représentant les branches d'équilibre chimique.

Le taux de réaction moyen total, $\tilde{\omega}_Y(\phi, \tau)$ calculé par MIL, est la somme des taux moyens de réaction sur les différentes branches. $\tilde{\omega}_{mel}(\phi, \tau)$, $\tilde{\omega}_{saut}(\phi, \tau)$ et $\tilde{\omega}_{eq}(\phi, \tau)$ sont les taux moyens de réaction sur les branches de mélange, d'inflammation et d'équilibre respectivement. On aura donc :

$$\tilde{\omega}_Y = \frac{\overline{\rho \dot{\omega}_Y}}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \tilde{P}(\phi) \int_{\tau_{ig}}^{\infty} \dot{\omega}_Y \tilde{P}_\tau(\tau) \text{ tel que :}$$

$$\tilde{\omega}_Y = \tilde{\omega}_{mel} + \tilde{\omega}_{saut} + \tilde{\omega}_{eq}. \quad (1.28)$$

- Le Modèle de la PDF transportée

Dans la méthode de transport de la fonction de densité de probabilité proposée pour la composition conjointe PDF par Dopazo, O'Brien et Pope [84, 85], une description statistique du système est fournie. Les processus de diffusion et la chimie sont traités sans couplage spécifique ; l'interaction doit être prise en compte par la modélisation du micromélange. L'utilisation des fonctions PDF (*Probability Density Function*), aussi appelées FDF (*Filtered Density Function*), est au centre de beaucoup de modèles de combustion prenant en compte l'interaction chimie/turbulence. La PDF filtrée $\tilde{P}(\psi)$ est définie en introduisant des informations statistiques sur la composition et la température avec $\psi = (\rho, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_{sp}}, T)$. Si cette PDF est connue, le taux de réaction local filtré est estimé par :

$$\tilde{\omega} = \int \dot{\omega}(\psi) \tilde{P}(\psi) d\psi. \quad (1.29)$$

Dans le cas purement gazeux, cette PDF vérifie une équation de transport sous la forme [86] :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{P}(\psi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{P}(\psi)] + \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial \psi_k} \left[\frac{1}{\rho} \dot{\omega}(\psi) \bar{\rho} \tilde{P}(\psi) \right] = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\langle u_j'' | \psi \rangle \bar{\rho} \tilde{P}(\psi)] + \sum_{k=1}^N \frac{\partial}{\partial \psi_k} \left(\left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{i,k}}{\partial x_i} | \psi \right\rangle \bar{\rho} \tilde{P}(\psi) \right), \quad (1.30)$$

avec $J_{i,k}$ le flux de diffusion moléculaire. Alors que les trois termes de gauche sont fermés, ceux de droite nécessitent des modèles de fermeture particulièrement complexes à obtenir. Le premier traduit la variation de la PDF par le transport turbulent et le deuxième exprime le mélange moléculaire dans l'espace des compositions.

Cette équation doit être résolue en parallèle des équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces. Or, le coût numérique lié à la résolution de cette équation est prohibitif au vu du nombre de dimensions de ψ . Afin de résoudre cette équation à un coût raisonnable, on utilise une méthode Monte Carlo pour obtenir une résolution approchée de la PDF, dont l'espace des phases a généralement été préalablement réduit.

- Conditional Moment Closure (CMC)

La fermeture conditionnelle des moments (CMC) développée par Klimenko [87] et Bilger [88] est basée sur une description des flammes de diffusion dans l'espace des fractions de mélange. Par conséquent, Au lieu de résoudre directement les fractions de masse et la température, la méthode résout les quantités conditionnelles $\overline{\rho \phi | Z}$, où ϕ représente soit la température, soit les fractions de masse des espèces et Z représente un niveau

de fraction de mélange. La méthode a également été étendue aux flammes prémélangées par Klimenko et Bilger [89], où les variables ont été conditionnées sur une variable de progression. Les quantités filtrées sont alors données par :

$$\bar{\rho}\tilde{\phi} = \int_0^1 (\overline{\rho\phi|Z})P(Z)dZ, \quad (1.31)$$

où $P(Z)$ est la fonction de densité de probabilité. La méthode requiert la solution de $N + 1$ équations de transport correspondant au nombre d'espèces considérées et à la température, plus N_Z équations de transport correspondant à chaque niveau de Z considéré. Afin de réduire les besoins de calcul, des versions simplifiées de ce modèle ont été proposées lorsque la distribution statistique est supposée. Cette dernière approche est appelée "approche conditionnelle présumée" (APC) [90].

1.1.4 Les modèles de turbulences

▷ L'approche RANS

Cette approche est la plus ancienne et l'une des plus utilisées pour les travaux de la dynamique des fluides en générale. Les équations RANS associées aux modèles de turbulence offrent l'approche la plus économique pour le calcul des écoulements turbulents et sont largement utilisées dans presque toutes les applications d'ingénierie et fournissent généralement le niveau de précision requis. Le principe est basé sur la décomposition de Reynolds des équations de Navier-Stokes, divisant chaque grandeur (vitesse et pression) en une moyenne et une composante fluctuante telle que illustrée à l'équation (2.12).

En introduisant l'équation (2.12) dans les équations de Navier-Stokes de type : $\frac{dW}{dt} + divF = 0$, plus précisément les équations de continuité et de moment instantanés et en prenant une moyenne de temps (ou d'ensemble), on obtient, les équations moyennées (2.19) et (2.20).

Le moyennage de Reynolds introduit un nouveau terme $-\overline{\rho u_i'' u_j''}$ dans l'équation de la quantité de mouvement, également appelée contraintes de Reynolds. Pour fermer le système, il est nécessaire de modéliser ces contraintes. Un principe courant pour cette modélisation consiste à utiliser l'hypothèse de Boussinesq [91].

- Approximation de Boussinesq : approche de viscosité turbulente

L'approximation de Boussinesq qui consiste à considérer la contrainte turbulente comme étant localement proportionnelle à la déformation du champ moyen :

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij}, \quad (1.32)$$

avec la quantité k qui est l'énergie cinétique turbulente, μ_t quant à elle est la viscosité turbulente, analogue de la viscosité μ pour les contraintes visqueuses.

Bien que cette hypothèse permette aux contraintes de Reynolds d'être représentées en termes de gradients de vitesse moyens, la viscosité μ_t des tourbillons qui dépend de l'écoulement reste à déterminer par modélisation. Il existe de nombreux types de modèles pour calculer μ_t ; quelques modèles mathématiques peuvent être consultés dans [92]. Dans notre thèse nous utiliserons les modèles à deux équations parmi celles que nous présentons sommairement dans les paragraphes suivants.

- Modèle à une équation

Dans les modèles à une équation, l'analogie des tourbillons turbulents en interaction, donnant lieu à une viscosité turbulente, est utilisée. La viscosité résultante dépend d'une vitesse caractéristique et d'une échelle de longueur caractéristique. Dans ces modèles, la vitesse caractéristique est rendue proportionnelle à la racine

carrée de k , l'énergie cinétique turbulente définie comme $k = 1/2 \overline{u'_i u'_i}$. L'échelle de longueur est considérée comme la longueur de mélange dans le modèle de Prandtl [48]. La valeur de k varie dans le domaine d'écoulement et est obtenue par une équation de transport de résolution pour k , qui peut être dérivée des équations de Navier-Stokes. Alors que ce modèle permet de tenir compte des influences advectives et diffusives sur k via son équation de transport, la principale faiblesse de devoir spécifier la longueur de mélange demeure. Ainsi, le modèle n'est pas applicable aux écoulements généraux puisqu'il n'est pas possible de trouver une expression générale pour une échelle de longueur algébrique.

Actuellement, le modèle à une équation le plus populaire est le modèle de Spalart-Allmaras [93]. Il a été démontré que ce modèle donne des résultats acceptables pour une grande variété de situations et est connu pour sa stabilité. Il a fait l'objet de quelques améliorations récentes [94]. Il existe d'autres modèles à une équation disponibles dans les codes parmi lesquels le modèle Baldwin-Lomax [95].

Les modèles à deux équations abordant avec succès la question de la détermination de l'échelle de longueur turbulente qui entre dans la détermination de la viscosité des tourbillons feront donc l'objet des paragraphes suivants.

- **Modèle Standard $k - \varepsilon$**

Le modèle standard $k - \varepsilon$ est un modèle à deux équations semi-empiriques [96] qui résout des équations de conservation approximatives pour l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation. Les équations de transport exactes pour k et ε sont dérivées des équations de Navier-Stokes. Cependant, sous cette forme, elles contiennent plusieurs termes inconnus représentant des corrélations du produit des termes fluctuants. Certaines d'entre elles sont modélisées sur la base de raisonnements physiques et autres, tandis que de nombreuses autres sont négligées. Cela apporte un certain empirisme et justifie le manque de précision des modèles de turbulence. Ce modèle est celui le plus utilisé des approches de turbulence RANS à deux équations et continu de faire l'objet de plus investigations CFD (Computational Fluids and Dynamic) [8,9]. Plus détails sur ce modèle sont donnés dans le chapitre 2.

- **Modèle RNG (Renormalization Group theory) $k - \varepsilon$**

Le modèle $k - \varepsilon$ standard présente les équations avec peu de données empiriques disponibles pour soutenir la modélisation des nombreux termes insolubles. En outre, il existe un certain nombre de «constantes» empiriques dont les valeurs sont attribuées différemment par différents chercheurs. La théorie des groupes renormalisée (RNG) est une technique mathématique qui a été utilisée pour tenter de surmonter cette lacune en fournissant une dérivation mathématique et physique solide du $k - \varepsilon$ et d'autres modèles de turbulence courants, y compris des coefficients constants calculés mathématiquement pour remplacer certains coefficients empiriques. Une description plus complète de la théorie RNG et de son application à la turbulence peut être trouvée dans [97]. Le modèle RNG $k - \varepsilon$ est similaire dans la forme aux équations $k - \varepsilon$ standard mais comprend un terme supplémentaire dans l'équation ε pour l'interaction entre la dissipation de la turbulence et cisaillement moyen, qui est efficace pour modéliser l'effet du tourbillon sur la turbulence. Il est ainsi capable de fournir des prévisions améliorées pour la courbure et le taux de déformation élevés des lignes de courant ainsi que pour les écoulements de transition, la chaleur des parois et le transfert de masse.

- **Modèle Realizable $k - \varepsilon$**

Le modèle "Realizable $k - \varepsilon$ " contient une nouvelle équation de transport pour le taux de dissipation de la turbulence ε [98]. De plus, un coefficient critique du modèle, C_μ , est exprimé en fonction des propriétés de

l'écoulement moyen et de la turbulence plutôt que d'être une constante supposée comme dans le modèle standard. Cela permet au modèle de satisfaire à certaines contraintes mathématiques sur les contraintes normales en accord avec la physique de la turbulence (réalisabilité).

- Modèle $k - \omega$

Le modèle $k - \omega$ a été proposé par Wilcox [99, 100]. Dans ce modèle, l'équation standard $k - \varepsilon$ est résolue, mais en tant que variable déterminant la longueur, ω est utilisé. Cette quantité est souvent appelée dissipation spécifique à partir de sa définition $\omega \sim \varepsilon/k$. Ce modèle intègre des modifications pour les effets de faible nombre de Reynolds, la compressibilité et la propagation du flux de cisaillement. Comme le modèle $k - \omega$ a été modifié au fil des ans, des termes de production ont été ajoutés aux équations k et ω , ce qui a amélioré la précision du modèle pour la prévision des écoulements de cisaillement libres.

- Modèle $k - \omega$ Shear Stress Transport (SST)

Le modèle de transport des contraintes de cisaillement (SST) $k - \omega$ développé par Menter et al. [101] est très populaire parmi les modèles $k - \omega$. Il combine le meilleur de deux modèles : l'utilisation d'une formulation $k - \omega$ dans les parties intérieures de la couche limite et le modèle $k - \varepsilon$ dans le flux libre. Le premier rend le modèle directement utilisable jusqu'au mur à travers la sous-couche visqueuse ; le modèle SST $k - \omega$ peut donc être utilisé comme un modèle de turbulence à faible nombre de Reynolds sans aucune fonction d'amortissement supplémentaire. Le passage au modèle $k - \varepsilon$ dans le flux libre dans la formulation de la SST évite le problème courant de $k - \omega$, à savoir que le modèle est trop sensible aux propriétés de turbulence du flux libre à l'entrée.

- Modèle "Reynolds Stress Model"

Dans le modèle de contrainte de Reynolds "Reynolds Stress Model" en anglais (RSM), l'hypothèse de Boussinesq n'est pas utilisée ; une telle approche ne peut pas rendre compte directement de l'effet des champs de force sur les flux turbulents. Les champs de force externes produisent une variété d'effets sur les écoulements turbulents en cisaillement, reflétant à la fois la non-linéarité intrinsèque des écoulements turbulents et les interconnexions implicites que le champ de force peut transmettre. En utilisant la fermeture par la RSM où les équations différentielles sont résolues pour chacune des six contraintes de Reynolds, il est possible de saisir l'effet direct d'un champ de force sur les taux de génération de la RSM sous une forme qui ne nécessite aucune autre approximation.

Une équation exacte décrivant le transport de la contrainte cinématique de Reynolds $u_i''u_j''$ peut être obtenue (voir Warsi [102]) en prenant un moment pondéré par la vitesse de fluctuation des équations de Navier-Stokes et en faisant la moyenne. Le résultat peut être exprimé comme suit :

$$\begin{aligned}
 \frac{D\overline{u_i u_j}}{Dt} &= \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial t} + \overline{u_k} \frac{\partial \overline{u_i u_j}}{\partial x_k} \\
 &= \underbrace{\overline{u_i u_k} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k}}_{P_{ij}} - \underbrace{\overline{u_j u_k} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k}}_{T_{ij}} - \underbrace{\frac{\partial \overline{u_i u_j u_k}}{\partial x_k}}_{\pi_{ij}} - \frac{1}{\rho} \left(\underbrace{u_i \frac{\partial p}{\partial x_j}}_{\pi_{ij}} + \underbrace{u_j \frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\pi_{ij}} \right) \\
 &\quad - \underbrace{2\nu \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_k} \frac{\partial \overline{u_j}}{\partial x_k}}_{\varepsilon_{ij}} + \underbrace{\nu \frac{\partial^2 \overline{u_i u_k}}{\partial x_k^2}}_{D_{ij}}.
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

Dans cette équation,

P_{ij} est le taux de production des contraintes ;

D_{ij} est le transport par diffusion moléculaire ;

ε_{ij} est le taux de dissipation ;

π_{ij} est le transport dû aux interactions pression-déformation turbulente ;

T_{ij} représente une diffusion turbulente des contraintes de Reynolds.

Ce modèle a pour avantage d'être plus générique. Le terme de production est traité avec précision et peut modéliser un écoulement avec des courbes de rationalisation, une flottabilité ou d'autres effets de champs de force importants. Ses inconvénients sont qu'il est plus compliqué, plus difficile à mettre en œuvre, plus sujet à des difficultés de convergence, et plus gourmand en CPU que les modèles à deux équations. Dans plusieurs cas le modèle RSM donne des bons résultats en accord avec l'expérimentale [91, 103, 104].

▷ L'approche LES

L'approche LES tente de résoudre de manière explicite les mouvements turbulents à grande échelle qui contiennent la majorité de l'énergie cinétique turbulente et contrôlent la dynamique de la turbulence. Les petites échelles non résolues ou les sous-échelles de la grille sont modélisées à l'aide de règles ou de modèles de fermeture de sous-réseaux. Cependant, lorsqu'elle est appliquée aux flux de combustion, l'avantage de la résolution du mouvement à grande échelle n'est pas applicable au terme de source chimique, car les échelles de temps chimiques sont beaucoup plus petites et la combustion doit donc être modélisée séparément. La plupart des modèles de combustion reposent sur une prédiction précise des quantités de turbulences et du champ de mélange qui en résulte. L'approche LES est encore un sujet de recherche intense et semble très prometteur puisqu'il peut prédire les structures cohérentes qui sont trouvées lors des instabilités de combustion. Cette technique semble toujours avoir l'avantage sur RANS en raison de sa capacité à prédire plus précisément (par rapport à RANS) le processus de mélange scalaire intense dans la plupart des flux complexes. Par rapport au DNS, la LES présente l'inconvénient que les résultats dépendent de la précision des modèles à l'échelle de la sous-grille qui sont utilisés. La contribution de la sous-grille au flux d'impulsion est calculée à l'aide du modèle de viscosité des tourbillons de Smagorinsky [105]. Ce modèle utilise une constante C_s , une largeur du filtre $\bar{\Delta}$ et un tenseur de vitesse de déformation $S_{i,j}$ selon l'Eq.(1.34) suivante :

$$\nu_t = C_s \bar{\Delta}^2 |S_{i,j}| = C_s \bar{\Delta}^2 \left| \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \right|. \quad (1.34)$$

L'approche LES nécessite une capacité informatique et des compétences d'utilisation plus élevées que la RANS. Il est montré dans les travaux antérieurs que les modèles LES donnent de meilleurs résultats que les modèles RANS et que les résultats sont proches des conditions réelles et expérimentales.

1.2 Enjeux de la Réduction des Mécanismes Cinétiques et Etat de l'Art

1.2.1 Coût de calcul associé aux simulations

À l'ère moderne des supercalculateurs et des simulations directes, les solutions numériques d'un système de réaction chimique complexe peuvent être construites beaucoup plus facilement une fois qu'une base de données fiable et à jour de toutes les réactions élémentaires pertinentes et de leurs taux de réaction est disponible. Dans un monde où les applications de combustion pourraient bénéficier énormément d'une meilleure compréhension de la complexité du phénomène de combustion, le coût du temps des calculs et l'espace mémoire des calculateurs demeurent une réelle préoccupation dans le cadre industriel. Dans cette optique, il serait difficile d'extraire des explications du phénomène de combustion à partir des sorties informatiques massives des solutions. Par conséquent, l'un des avantages de travailler avec un modèle simplifié qui peut gé-

nérer des solutions similaires à celles du modèle de chimie complet est la facilitation de la gestion des résultats des simulations de combustion. Un autre avantage majeur pour simplifier un mécanisme de réaction chimique est de réduire les nombreuses ressources de calcul habituellement requises pour des simulations chimiques détaillées. L'évaluation du taux chimique peut être prouvée comme étant asymptotiquement peu coûteuse. Cela se produit lorsque l'évaluation des taux chimiques est une fonction linéaire du nombre de réactions I et également du nombre d'espèces K , en raison de la relation linéaire entre elles [106] :

$$I \approx 5K. \tag{1.35}$$

La Figure 1.5, illustre la relation linéaire entre le nombre d'espèces et le nombre de réactions suivant les hy-

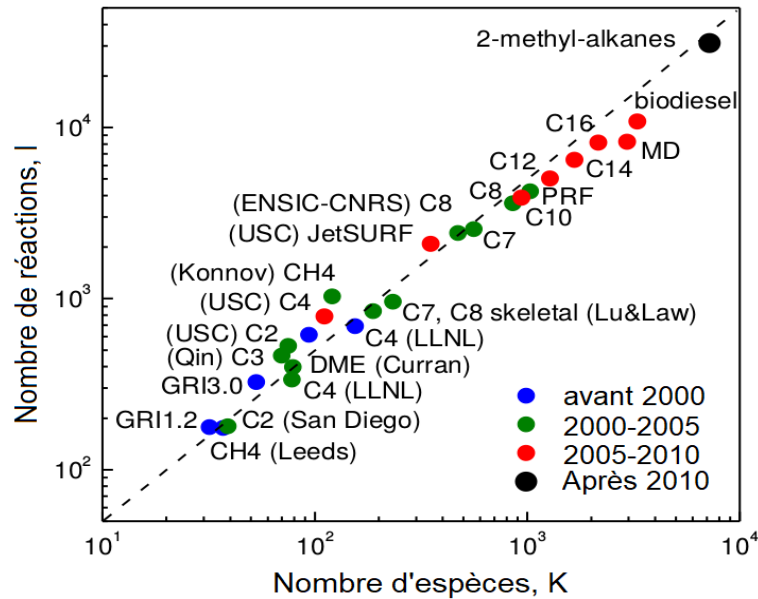


FIGURE 1.5 – Dépendance de la taille du mécanisme pour certains combustibles hydrocarbonés par rapport à la taille moléculaire et à la date de libération du mécanisme [107].

drocarbures avant et après 2005 et 2010. Plusieurs approches majeures peuvent être adoptées pour aborder les simulations de mécanismes chimiques complexes, tels que la réduction de dimension qui traite des espèces et des réactions, la réduction de la diffusion, l'élimination de la rigidité et les méthodes de minimisation des coûts de calcul (CCM). En plus de la réduction des matrices de rigidité, il existe d'autre façon de limiter les coûts numériques des simulations. Nous avons les techniques de type décomposition de domaines qui sont adaptées à l'utilisation des ordinateurs à architecture parallèles. Une autre approche possible consiste à rechercher des techniques de renumérotation des nœuds des maillages pour limiter l'encombrement en utilisant la structure creuse des matrices de rigidité. Ces techniques sont aussi compatible avec le développement de solveurs parallèles.

1.2.2 Importance de la réduction des mécanismes

Le plus grand défi de la cinétique de combustion consiste à développer les mécanismes détaillés pour décrire les carburants réalistes, c'est-à-dire les carburants de haut niveau de complexité. L'emploi de modèles de mécanismes cinétiques réalistes et détaillés est nécessaire à la prédiction de ces grandeurs thermophysiques et chimiques intervenant dans la combustion. Cependant, ces mécanismes cinétiques détaillés de réactions élémentaires, sont généralement conçus pour modéliser avec précision l'oxydation du carburant ou l'auto-inflammation sur un large domaine de température, de pression et d'espace de concentration initiale. Selon

la complexité du combustible initial, le modèle détaillé peut être composé d'une dizaine d'espèces (H_2) à quelques milliers ($C_{10}H_{22}$). Cependant, la résolution numérique de systèmes complexes réactifs impliquant des mécanismes cinétiques détaillés est très coûteuse en temps de calcul. Dans ce contexte, un grand nombre de méthodes numériques ont vu le jour dans le but de simplifier les modèles cinétiques, en limitant le nombre d'espèces impliquées. Elles réduisent le nombre d'équations différentielles à résoudre et accélèrent le calcul des termes sources en supprimant les réactions faiblement importantes. En générale, ces méthodes de réduction vise à réduire ces mécanismes à la plus petite taille possible, tout en optimisant les caractéristiques nécessaires et conservant les réactions élémentaires importantes.

Dans de nombreux modèles de combustion utilisés dans les codes de calcul, la cinétique chimique est réduite à une expression empirique en une seule étape ou à des schémas globaux en plusieurs étapes. Cependant, une meilleure connaissance de la cinétique chimique de la combustion est essentielle pour la qualité de la prédiction de nombreux phénomènes importants tels que les délais d'ignition, la vitesse de la flamme, la stabilité de la flamme, le taux de dégagement de la chaleur, les émissions de polluants, etc... Dans cette optique, plusieurs études dans le domaine de la cinétique chimique ont été consacrées à la conception de mécanismes de réaction de plus en plus complexes pour la représentation de l'oxydation des hydrocarbures. Cependant, la réduction des coûts de simulations qui sont de plus en plus élevés en raison de ces mécanismes chimiques de combustion complexes, est un grand défi à relever tant pour les industriels que pour les chercheurs.

1.2.3 Travaux antérieurs

De nos jours, plusieurs travaux menés dans l'élaboration et l'application des méthodes de réduction des mécanismes de combustion turbulente, sont légions. Dans cette section, nous passons en revue les méthodes existantes utilisées pour réduire le coût de l'utilisation des mécanismes de réaction chimique détaillés dans les simulations d'écoulement réactif, rassemblées sous le terme générique de «réduction de mécanisme». Parmi le large éventail de méthodes développées, la plupart peuvent être classées en trois catégories principales :

- Méthodes de réduction d'échelle de temps qui traitent de la rigidité ;
- Méthodes de réduction du squelette qui éliminent les espèces et les réactions sans importance ;
- Méthodes de stockage et d'extraction/tabulation qui remplacent une solution directe des équations cinétiques chimiques gouvernantes par des quantités stockées ou modélisées.

Les méthodes de chacune des trois catégories peuvent être utilisées individuellement ou par paires pour la plus grande vitesse de calcul. Les méthodes de réduction des mécanismes, sont également détaillés dans les travaux de Tomlin *et al.* [108], Lu et Law [109], Turanyi et Tomlin [110] et Delaroque [111].

► Méthodes de réduction employant l'échelle de temps

Les équations régissant la cinétique chimique font partie des équations raides [112]. Une équation différentielle raide est une équation différentielle dont la sensibilité aux paramètres va rendre difficile la résolution par des méthodes numériques explicites. La raideur naît d'une différence d'échelle entre deux phénomènes dynamiques. Les raisons principales de la raideur des équations régissant la cinétique chimiques sont que les espèces présentent des durées de vie très différentes les unes des autres et que les temps caractéristiques des réactions sont bien plus courts que ceux des phénomènes de transport. En effet, les échelles de temps caractéristiques de la chimie peuvent couvrir des ordres de grandeur allant de 10^{-10} à plusieurs secondes. À titre de comparaison, les phénomènes physiques régissant les écoulements ont généralement des temps caractéristiques de l'ordre de 10^{-5} à 10^{-2} secondes [110].

Les méthodes de réduction employant l'échelle de temps ont pour but de gérer la rigidité d'une manière ou d'une autre. Les approches générales consistent à éliminer la rigidité, en supprimant les échelles de temps courtes par rapport aux échelles de temps d'intérêt. Ces échelles de temps courtes sont attribuées aux espèces qui s'épuisent rapidement et /ou aux réactions réversibles rapides.

Approximation de l'Etat Quasi-Stationnaire (AEQS)

Dans cette méthode s'appuyant sur le principe de Bodenstein, qui découvrit que certaines espèces s'épuisaient rapidement après une période transitoire initiale, passant dans un état quasi-stationnaire (EQS) [113], les intermédiaires réactionnels très réactifs sont consommés très rapidement après leur formation. Il y a une compensation rapide de leur production par leur consommation après un bref état transitoire. C'est ce qui explique leur faible concentration et les équations de conservation des espèces peuvent s'écrire par :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}(\rho(u_j + V_{k,j})Y_k) = \dot{\omega}_k \approx 0. \quad (1.36)$$

Cette équation se rapporte donc à une équation algébrique plus facile à résoudre. Sa résolution est faite de manière simultanée au système d'équation différentielle car le taux de production et de consommation des espèces $\dot{\omega}$ est fonction des vitesses de réaction et des concentrations. En supposant que les espèces en AEQS présentent des échelles de temps inférieures à celles des autres espèces, la réduction de la raideur du système et du nombre d'équations aux dérivées partielles à résoudre est possible.

L'AEQS est basé sur les hypothèses suivantes : premièrement, les espèces à appauvrissement rapide peuvent atteindre une faible concentration assez rapidement et ils restent dans cet état ; deuxièmement, la réaction résultante des taux d'espèces EQS sont bien inférieurs à leurs taux de production et de destruction correspondants. L'approximation de l'état quasi stationnaire était à l'origine effectuée manuellement, que ce soit pour l'identification et la sélection des espèces que pour la mise en forme du système et la résolution de celui-ci. Puisque les mécanismes se sont de plus en plus complexifiés, la procédure de l'AEQS a été automatisée et est encore très utilisée de nos jours. Plusieurs techniques sont utilisées pour identifier les espèces susceptibles d'être en AEQS telles que : l'analyse du taux de production, l'identification des éléments diagonaux de la matrice Jacobienne, les pointeurs de la méthode CSP, etc...

Approximation de l'Equilibre Partiel (AEP)

C'est une méthode utilisée depuis longtemps pour l'analyse et la simplification des mécanismes [114]. Elle est employée lorsque les vitesses directes et inverses de réaction de formation d'une espèce sont bien supérieures à la vitesse de réaction de consommation de cette espèce. Un équilibre peut donc s'établir rapidement entre les réactions de formation directes et inverses. Cette approximation, tout comme l'AEQS, repose sur le principe de la séparation des échelles temporelles [19,20] : l'état transitoire correspond à une échelle de temps rapide et l'état d'équilibre à une échelle de temps plus lente.

Computational Singular Perturbation (CSP)

La technique de réduction du CSP est basée sur une séparation rigoureuse à l'échelle du temps qui divise le terme source chimique en sous-espaces lents et rapides et construit des mécanismes qui présentent une rigidité beaucoup plus réduite que le système initial. Cette méthode a été proposée pour la première fois par Lam en 1985 [21], qui a formalisé les idées fondamentales avec D.A. Goussis [22,23]. Le CSP permet de définir les deux sous-espaces temporels. Un sous-espace dit rapide, est construit à partir des M modes les plus rapides, c'est à dire ceux associés aux M valeurs propres ayant les plus grandes parties réelles négatives. Les autres

modes forment le sous-espace lent. Cette méthode permet de mettre en état d'équilibre les espèces rapides associées au sous-espace rapide. Le terme source chimique $\dot{\omega}$ est donc exprimé ainsi qu'il suit :

$$\begin{aligned}\dot{\omega} &= \dot{\omega}_{fast} + \dot{\omega}_{slow} \\ &= A_{fast} z^{fast} + A_{slow} z^{slow}\end{aligned}\quad (1.37)$$

avec $A_{fast} = [a_1, \dots, a_M]$ et $A_{slow} = [a_{M+1}, \dots, a_{N_{sp}}]$ des sous-espaces vectoriels et $z_{fast} = B^{fast} \dot{\omega}$ et $z_{slow} = B^{slow} \dot{\omega}$ les amplitudes associées. Les vecteurs constituant les matrices A et B sont liés par la relation : $b^i a_j = \delta_j^i$. Ils sont déterminés par une méthode itérative dont le détail peut être trouvé dans l'article de Lam et Goussis [24]. Dans cette base des modes, les modes lents et rapides sont découplés. Il est alors aisé de distinguer des modes dits "dormants" participant peu à la réactivité et des modes très rapides atteignant rapidement un état d'équilibre. Cependant, la base des modes doit régulièrement être recalculée ce qui demande un effort numérique important. Très récemment, plusieurs travaux ont été développés dans le cadre de la méthode CSP appliquée à la simulation des flammes turbulentes [8, 10].

Intrinsic Low-Dimensional Manifold (ILDM)

La méthode "Intrinsic Low-Dimensional Manifold" (ILDM) a été présentée pour la première fois par Maas et Pope en 1992 [27]. Comme dans le cas de la CSP, l'ILDM est basée sur l'établissement d'une séparation significative entre les sous-espaces à échelle temporelle lente et rapide, où les espèces à échelle temporelle lente définissent un domaine lent qui décrit l'évolution du système de réaction chimique. L'utilisation de cette méthode permet d'obtenir une tabulation de la chimie capable de décrire n'importe quel régime de combustion. L'ILDM est basée sur une approche mathématique rigoureuse des processus chimiques, elle ne dépend donc pas de la topologie de la flamme. En utilisant cette technique, si N_{sp} est le nombre d'espèces impliquées dans un mécanisme cinétique détaillé donné, la combustion est caractérisée par un système : un système de N_{sp} équations. Le sous-espace (collecteur de basses dimensions) d'intérêt est déterminé en étudiant les valeurs propres et les vecteurs propres du système d'équations et en négligeant les échelles de temps qui sont plus petites qu'une limite de temps définie. Il convient de mentionner que les inverses des valeurs propres sont en fait les échelles de temps correspondantes. Le nombre minimum d'espèces qui doivent être transportées pour prédire le comportement du système réactif complet est reflété par le nombre de coordonnées du collecteur. Cependant, les manifolds ILDM très réduits ne reproduisent généralement pas raisonnablement les phénomènes corrélés aux échelles de temps rapides. Plus précisément, les régions de flamme à basse température ne peuvent pas être traitées de manière raisonnable [28]. L'objectif principal de cette méthode n'est pas de réduire la rigidité du système "ODE" mais, plutôt de réduire l'espace d'état des systèmes de réaction afin de pouvoir le tabuler pour une utilisation ultérieure.

► Méthodes DRG pour la réduction squelettique

Les techniques de réduction du squelette, qui retirent du mécanisme détaillé les espèces et les réactions jugées négligeables pour les phénomènes importants dans la gamme des conditions d'intérêt (par exemple, pression, température et rapport d'équivalence), ont également été largement développées. Il existe plusieurs méthodes classiques de réduction du squelette présentées dans [41]. Nous nous appesantirons sur la méthode DRG et ses variantes qui font l'objet de ce travail et dont une présentation plus détaillée sera faite au Chapitre 2.

La méthode du graphe de relation dirigée (DRG), proposée à l'origine par Lu et Law [33, 34], a récemment fait l'objet d'une grande attention pour la réduction des mécanismes squelettiques. Comme la représentation graphique des voies de réaction développée par Bendtsen *et al.* [37], la méthode DRG quantifie l'importance des espèces en cartographiant le couplage inter-espèces sur un graphique orienté pondéré et en éliminant

les connexions non importantes dans le graphique résultant à l'aide d'un seuil de coupure. Ensuite, elle effectue une recherche de graphe initiée à des espèces cibles sélectionnées pour trouver des espèces connectées - l'ensemble des espèces accessibles constitue le mécanisme squelettique. Lu et Law ont montré que la méthode DRG était une approche particulièrement efficace et fiable pour réduire les grands mécanismes de réaction [34]. Les variantes de la méthode DRG originale comprennent la méthode DRG avec propagation d'erreur (DRGEP) [38], qui considère la propagation géométrique de la dépendance le long des trajectoires du graphique de telle sorte que les espèces plus éloignées sont moins importantes, et l'analyse de flux de trajectoire [39], qui considère séparément les espèces directes et les espèces non directes et les contributions indirectes (par le biais d'une seule espèce intermédiaire) à la production d'espèces et les taux de consommation. Récemment, Luo et al [40] ont mis à jour le coefficient d'interaction DRG pour mieux représenter la dépendance inter-espèces en présence de nombreux isomères.

En outre, le DRG et le DRGEP ont été combinés avec une analyse de sensibilité des espèces restantes pour produire un mécanisme squelettique plus compact que celui possible avec les seules méthodes originales : les méthodes DRGDRG-aided sensitivity analysis (DRGASA) et le DRG-with error propagation and sensitivity analysis (DRGEP-SA) [40–45]. Niemeyer *et al.* [45] ont démontré que la DRGEP-SA, génère des mécanismes squelettiques plus compacts que la DRG, la DRGEP ou la DRGASA tout en conservant la même précision. Une méthode similaire combinant DRGEP et DRGASA a également été présentée par Zsély *et al.* [46] pour l'allumage de mélanges de gaz naturel, bien que leur méthode n'ait pas été explorée en détail et n'ait été appliquée qu'à des mécanismes plus petits. Il faut cependant souligner que la partie analyse de sensibilité (SA) de DRGASA et DRGEP-SA ajoute des coûts de calcul importants lors de la réduction du mécanisme. Bombalini a développé un mécanisme compact d'oxy-fuel avec une approche "multi-étape" qui intègre les principaux aspects des méthodes DRG et DRGASA, couplé au modèle des flammes [47]. Il a été démontré que cette approche combinée permet de surmonter les faiblesses des deux méthodes (DRG et DRGASA) individuelles.

1.3 Généralité sur les Biogaz

1.3.1 Production des biogaz

La méthanisation est le processus naturel biologique de dégradation et de transformation de la matière organique, par la décomposition bactérienne de la biomasse dans des milieux stagnants anaérobies (absence d'oxygène) tels que les rizières ou les marécages. Étant donné la raréfaction des ressources naturelles et l'incitation à la production des énergies vertes, il paraît intéressant de s'inspirer de ce phénomène naturel pour produire du méthane vert à partir de déchets. Ce procédé est alors basé sur la dégradation par des microorganismes de la matière organique, en conditions contrôlées et en l'absence d'oxygène [115]. Il conduit à la formation d'un mélange gazeux riche en grande partie de méthane (CH₄) et dioxyde de carbone (CO₂) qui donne lieu au biogaz. Son principe est le suivant :



La méthanisation peut s'appliquer à différentes matières comme la fraction organique des déchets ménagers, les boues de fosses septiques, les déchets municipaux, organiques, d'élevage et d'agriculture (lisier de porc, fumier, pailles, ...), le sous-produit industriel, les boues de station d'épuration, les résidus de distillation de vin, etc...

Le processus anaérobie décompose les matières organiques biodégradables complexes en quatre étapes : l'hydrolyse, l'acidogénèse, l'acétogénèse et la méthanogénèse. Les microorganismes spécifiques des premières étapes servent de substrats pour les étapes suivantes (Fig-1.6) :

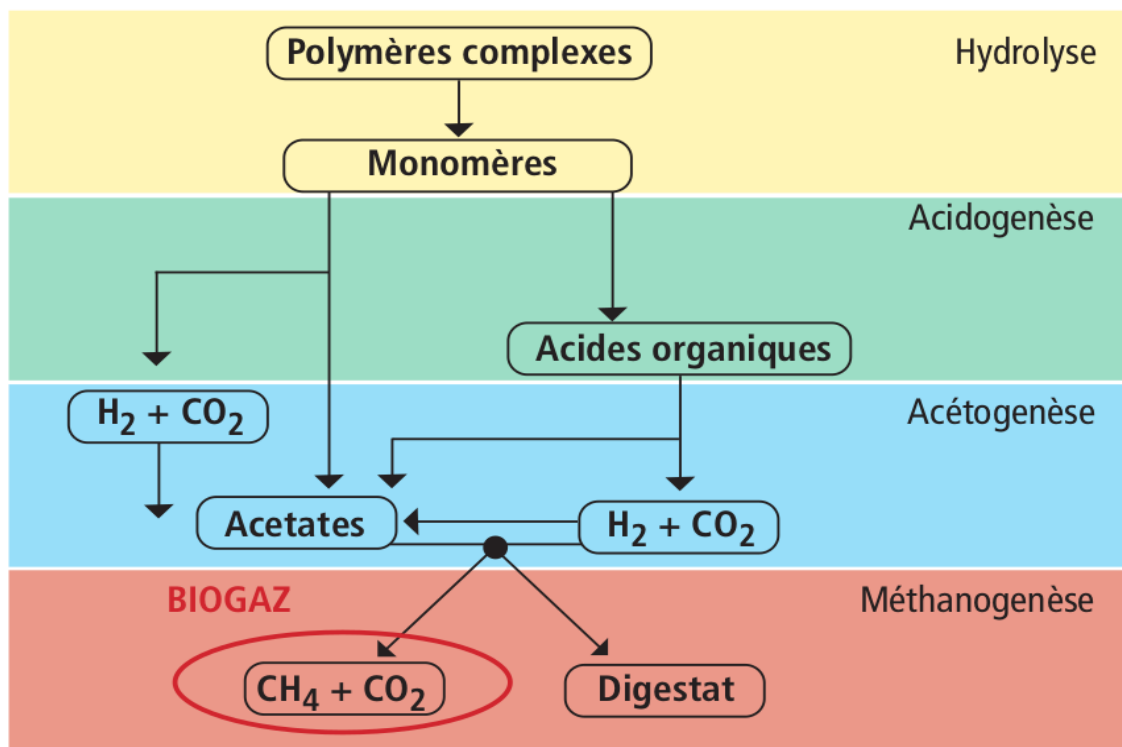


FIGURE 1.6 – Étapes de la digestion anaérobique.

Au cours de la première étape (l'hydrolyse), de grandes macromolécules de protéines, des graisses et des polymères d'hydrates de carbone sont convertis en acides aminés, en acides gras à longue chaîne et en sucres. Ensuite, elle se transforme en acides gras volatils par un processus d'acidogénèse. Le processus suivant est l'acétogénèse, où les acides gras volatils se transforment en acide acétique, en dioxyde de carbone et en hydrogène. Ces produits sont consommés par les bactéries pour former du méthane par méthanogénèse. La méthanogénèse est ensuite divisée en 2 grandes voies : la voie des acétotrophes qui transforme l'acétate en méthane et CO_2 et la voie des hydrogéntrophes qui consomme H_2 et CO_2 pour former du CH_4 . D'autres voies sont envisageables telles que celle des méthylotrophes. Parmi les réactions possibles, on peut citer entre autres les 3 suivantes [116] :

Voie acétotrophes : $4\text{CH}_3\text{COOH} \longrightarrow 4\text{CO}_2 + 4\text{CH}_4$;

Voie hydrogéntrophes : $\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \longrightarrow \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$;

Voie méthylotrophe : $4\text{CH}_3\text{OH} \longrightarrow 3\text{CH}_4 + \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$.

Le méthane (CH_4) est le principal composant du biogaz qui est inflammable et détermine le contenu énergétique. La teneur en méthane du biogaz varie entre 50 et 75 % [117]. Les caractéristiques typiques du biogaz sont présentées dans le tableau 1.2.

Tableau 1.2 – Caractéristiques générales du biogaz.

Composition du Biogaz	Contenu Énergétique	Température d'ignition	Pression critique	Température critique	Densité	Masse molaire
55-70% CH_4 30-45% CO_2 Autres gaz	21.6 MJ/m ³	650-750°C	75-89 bar	-82.5°C	1.2 kg/m ³	10.043 kg/kmol

Les autres composants sont des impuretés qui sont généralement éliminées par un processus de valorisation après le digesteur. Ces impuretés sont entre autres le dioxyde de carbone, le sulfure d'hydrogène et la vapeur d'eau, chacun d'eux a un effet différent sur les caractéristiques du biogaz. Elles causent la diminution du pou-

voir calorifique, la corrosion des équipements, la formation des gaz polluants après combustion (SO_2 , NO_2), l'augmentation des propriétés antidétonante des moteurs à combustion, etc [118]. Les pays développés ont des normes différentes en matière de teneur en biogaz pour l'injection dans le réseau et l'utilisation comme carburant pour les véhicules [119].

1.3.2 Valorisation du biogaz

La digestion anaérobie crée deux produits, à savoir le biogaz et le digestat. Le biogaz contient du méthane qui est inflammable comme le gaz naturel. De façon générale, le biogaz peut être utilisé en substitut du gaz naturel dans toutes les applications où celui-ci est utilisé comme combustible. Toutefois, le niveau de qualité requis doit être similaire à celui du gaz naturel. En particulier, le CO_2 doit être éliminé pour produire du «biométhane», dont le pouvoir énergétique est comparable à celui du gaz naturel. Cette étape se nomme enrichissement ou «upgrading». Ce type de valorisation est encore en voie de développement [120]. Il existe de nombreuses possibilités d'utilisation du biogaz, parmi lesquelles :

- Utilisation directe pour la cuisine et l'éclairage ;

L'utilisation du biogaz pour la cuisine et l'éclairage est adaptée aux installations de digestion anaérobie à petite échelle, généralement dans les ménages. La combustion du biogaz émet également moins de pollution que la combustion d'autres types de biomasse, ce qui permet de réduire la qualité de l'air intérieur des ménages.

- Production d'électricité et de chaleur ;

Le biogaz a généralement un pouvoir calorifique de 50 à 70 % de celui du gaz naturel [121]. Ainsi, la combustion du biogaz dans un générateur à moteur à gaz ou une chaudière à gaz peut produire de l'électricité et de la chaleur. Les performances du générateur (groupe électrogène), en raison de la faible valeur calorifique du biogaz brut, diminuent d'environ 32 % lorsqu'il est alimenté au biogaz brut. Les performances en termes de puissance de freinage et de couple sont presque similaires lorsqu'il est alimenté par de l'essence, du biogaz ou du GPL [122].

- Carburants pour véhicules ;

Comme le biogaz a une moins grande densité d'énergie que le GN, des changements doivent être apportés au système d'injection du carburant d'un VGN pour que le biogaz soit utilisé efficacement. Avant de ravitailler directement un véhicule avec du biogaz, s'assurer que le fabricant garantisse son véhicule quand celui-ci est alimenté au biogaz. Les véhicules fonctionnant au biogaz peuvent réduire les émissions de CO_2 de 75 à 200 % par rapport aux carburants fossiles [123].

- Alimentation du réseau de gaz naturel ;

L'injection de biogaz dans le réseau de gaz naturel permettra de réduire l'utilisation de combustibles fossiles. Cependant, la valorisation du biogaz doit être faite de manière à ce que le biogaz ait la même qualité que le gaz naturel. L'injection de biogaz dans le réseau de gaz permet de transporter le biogaz sur de longues distances et de l'utiliser pour les différents types de conversion d'énergie mentionnés ci-dessus.

- Engrais (Digestat du biogaz) en agriculture.

Le digestat ou l'effluent de la digestion anaérobie peut être utilisé comme engrais. Il peut minimiser la pollution olfactive et atténuer les maladies parasitaires. Le digestat est constitué de 60 à 80 % d'azote sous forme d'ammoniac. L'utilisation du digestat comme engrais permet de réduire les pertes par lixiviation de

l'ammoniac. Le digestat contient également du phosphore, qui est une ressource limitée et en diminution [124]. Ainsi, l'utilisation du digestat réduira l'utilisation d'engrais chimiques.

1.3.3 État de l'art sur l'étude de la combustion du biogaz

La combustion du méthane constitue l'essentielle de la valorisation du biogaz dans différents systèmes de combustion. Les recherches liées à celle-ci restent un réel défi tant dans la cinétique chimique que dans la performance des biogaz dans les systèmes de combustion.

- Les mécanismes chimiques de combustion du biogaz

Plusieurs études ont été menées dans le but d'évaluer dans quelle mesure les mécanismes de réaction existants peuvent capter la combustion du biogaz lequel est constitué en majorité de CH_4 à 40-75%, de CO_2 à 25-55%, et probablement de 0-10% d'hydrogène [125].

Selon Fischer *et al.* 2016 [125], un mécanisme de réaction capable de décrire la combustion du biogaz doit pouvoir décrire correctement la combustion séparée du CH_4 ; H_2 et CO_2 . Toutefois, cette condition n'est pas suffisante, car la présence simultanée de méthane et de dioxyde de carbone peut modifier le comportement chimique de l'ensemble du système de manière imprévisible. Par conséquent, il est nécessaire d'évaluer la performance des mécanismes de réaction responsables de la combustion des hydrocarbures pour la combustion du biogaz. Le mécanisme détaillé du "Gas Research Institute" version 3.0 (GRI 3.0) [126], le mécanisme réduit (DRM) [127] et le mécanisme de Heghes [128] sont des exemples de mécanismes de réaction détaillés qui expliquent la combustion des hydrocarbures légers.

D'après les travaux de Fischer *et al.* 2015 [129], l'utilisation à grande échelle du biogaz dans les systèmes de combustion nécessite une bien meilleure compréhension de son comportement cinétique ; condition nécessaire à la réalisation de prévisions fiables. Dans ces travaux, cinq mécanismes de réaction présentés dans [129] ont été utilisés à cette fin. Les expériences d'allumage impliquant divers mélanges de biogaz de CH_4 , N_2 et CO_2 ont été simulées et tous les modèles ont été raisonnablement bons, à l'exception du mécanisme de Heghes [128]. Le mécanisme de réaction du GRI 3.0 a apporté la meilleure correspondance globale et a donc été utilisé pour prédire la formation des polluants CO et NO dans les mêmes conditions que celles des expériences. En général, une plus grande abondance de dioxyde de carbone diminue la quantité de NO produit et augmente la formation de CO à des températures plus élevées. Ces travaux montrent que les mécanismes détaillés de combustion de CH_4 , permettent de faire une prédiction dans des conditions particulières, en prenant en compte des constituants du biogaz.

- La performance des biogaz dans les systèmes de combustion

Les biogaz présentent économiquement des difficultés à être utilisés car leur pouvoir calorifique est très faible et les coûts induits de leur valorisation sont élevés. Afin de surmonter les lacunes susmentionnées, Chen *et al.* [130] ont dans leur article évalué la faisabilité de l'utilisation des biogaz dans le cadre de l'opération d'oxy-combustible MILD (Moderate or Intense Low-oxygen Dilution). Une configuration à contre-courant couramment utilisée est adoptée comme prototype de recherche dans ce travail. Les effets de la température préchauffée des mélanges d'oxydants, la concentration d'oxygène dans le flux d'oxydants et la concentration d'hydrogène dans les mélanges de combustibles sur la structure réactionnelle du biogaz dans les nouvelles conditions de combustion sont étudiés à l'aide de la méthode LBM (Lattice Boltzmann Method). Ce travail fournit une base théorique solide pour développer un nouveau schéma pour répondre au défi posé par les émissions de CO_2 . En outre, il présente les limites des modélisations des flammes couramment utilisées et souligne l'urgence de développer de nouveaux modèles de combustion turbulente pour cette nouvelle stratégie de combustion des biogaz.

Colorado *et al.* [131] ont évalué les performances des équipements thermiques lors de l'utilisation de biocarburants, qui sont généralement obtenus par gazéification de la biomasse et des excréments d'animaux dans des biodigesteurs. L'effet de l'utilisation du biogaz sur la performance d'un four expérimental équipé d'un brûleur sans flamme auto-régénérateur est présenté dans leur article. Tous les résultats ont été comparés à la performance du système alimenté au gaz naturel. Les résultats ont montré que le champ de température et l'uniformité sont similaires pour les deux combustibles ; bien que les températures du biogaz soient légèrement inférieures en raison de la plus grande quantité de gaz inertes (CO_2) dans sa composition qui refroidissent les réactions. Les prédictions des espèces et les émissions polluantes ont montré des tendances et des valeurs similaires pour les deux combustibles, et le bilan énergétique du biogaz a montré une légère réduction de l'efficacité du four. Il faut préciser qu'il n'a pas été nécessaire d'apporter des modifications importantes au brûleur pour faire fonctionner le système au biogaz.

Les études de Li *et al.* [132] ont été effectuées dans le cadre de la caractérisation de la combustion et du dégagement de la chaleur des flammes non pré-mélangées du biogaz sous diverses conditions d'enrichissement en hydrogène et en oxygène en utilisant des mécanismes chimiques détaillés. Les résultats ont montré que le taux de réaction net de biogaz augmente avec l'augmentation du taux d'addition d'hydrogène et des niveaux d'oxygène, ce qui entraîne le taux net de dégagement de chaleur de la flamme du biogaz. Il est observé que la longueur de la flamme a été raccourcie avec l'augmentation du rapport d'addition de l'hydrogène et d'oxygène.

La littérature limitée sur le biogaz a conduit à une étude de Angelo Greco *et al.* [133] sur les effets de la composition du combustible sur la combustion du biogaz dans une flamme laminaire pré-mélangée. Les résultats ont montré que la concentration de méthane a un impact significatif sur le processus de combustion. L'étude a examiné les effets de la composition du combustible sur la combustion du biogaz, dans une flamme laminaire unidimensionnelle pré-mélangée.

Plusieurs autres travaux ont fait l'objet d'analyse particulière sur la combustion des biogaz [134–137, 139, 140, 186]. Il ressort de ces études que la compréhension et la modélisation de la combustion des biogaz demeure un challenge majeur. Le principal défi de l'application à grande échelle et de la modélisation du biogaz est l'instabilité de ses composants, qui est due aux différences dans le processus de production, dépendant des matières premières.

1.3.4 La part du biogaz dans l'énergie au cameroun

Le Cameroun est doté d'un vaste potentiel de ressources énergétiques. Cependant, leur niveau de valorisation est déplorable, entraînant ainsi des défis énergétiques aigus. Par conséquent, la plupart des Camerounais, principalement les habitants des zones rurales, sont dépendants de la biomasse et des produits pétroliers traditionnels pour leurs besoins énergétiques de base, malgré les effets néfastes sur la santé et l'environnement qui y sont associés [141]. Les énergies renouvelables sont majoritaires (74,4%) dans la production électrique camerounaise grâce à une filière hydraulique bien développée (73,3%), assistée par la biomasse, dont la contribution au mix électrique du pays reste assez modeste (1%) [142]. Toutefois, les bioénergies et les déchets (principalement la biomasse), sont les principales sources d'énergie du pays et représente 64,5 % de son approvisionnement en énergie primaire, suivi par le pétrole, le deuxième en importance avec 22,5%, l'hydroélectricité et le gaz naturel, qui contribuent respectivement à 5% et 7,3%. (Fig. 1.7) [143]. Des études montrent que le pays dispose d'un accès modéré à l'électricité avec un taux d'électrification de 55% en 2013, avec plus de 10 millions de personnes n'ayant pas accès à l'électricité [144]. En 2016, les taux d'électrification ont été répartis comme suit : 88% urbain et 17% rural [145]. Le complément de la production de l'énergie électrique est réalisé par des centrales thermiques qui fournissent un peu plus du quart des besoins nationaux (25,6%). Le réseau électrique est renforcé par 6 centrales thermiques «diesel» connectées aux réseaux : Oyomabang (32 MW, dont 19,5 MW

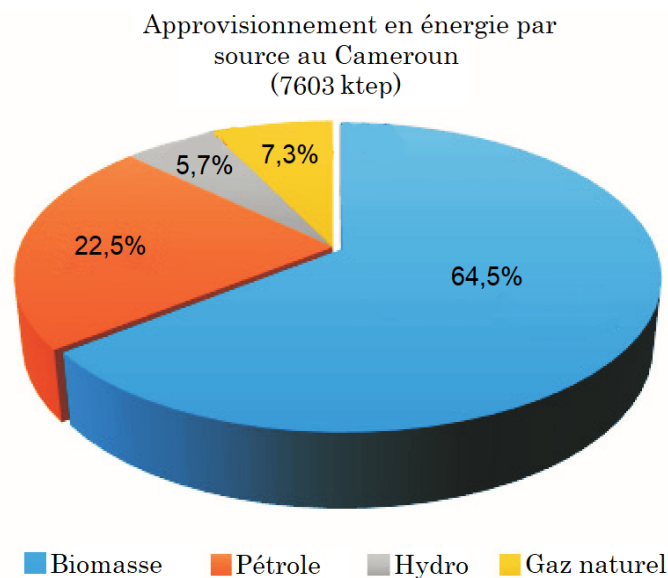


FIGURE 1.7 – *Energies primaires du Cameroun.* [141]

au fioul lourd), Bassa (18 MW), Logbaba (18 MW), Bafoussam (14 MW), et Limbé (85 MW) [146]. La filière hydraulique connaît une progression régulière au cours de la période 2002-2012, avec un taux de croissance annuel moyen de 3,7% ; sa production atteint 4,6 TWh en 2012 [142]. Cette dynamique est caractéristique des années 2000 en Afrique subsaharienne, au cours desquelles la hausse du prix des hydrocarbures a augmenté la rentabilité des projets d'aménagements hydrauliques. Le Cameroun dispose d'un des meilleurs potentiels hydroélectriques africains, près de 70 % du productible se concentrant autour du fleuve Sanaga qui pourrait être doté à terme d'une capacité de 6 000 MW, d'après l'Agence de développement de l'énergie électrique au Cameroun. Bientôt, le réseau électrique camerounais se verra agrandir grâce aux barrages de Lom Pangar et Memve'ele dont les constructions sont en cours d'achèvement. Le pays prévoit également de renforcer la puissance des barrages hydroélectriques de Song Loulou et d'Edea avec 1 270 MW supplémentaires. Le projet de construction des centrales solaires dans plus de 1 500 localités du pays, participant ainsi au processus d'électrification rurale initié par le gouvernement est entrain d'être mis en oeuvre. La part des énergies renouvelables a diminué au cours des années 2000-2015, passant de 96,4% à 74,4% du mix national [142], le Cameroun ayant investi dans ses capacités de production d'électricité fossile pour faire face à l'augmentation rapide de sa demande énergétique. Les énergies vertes ont néanmoins continué à se développer à un rythme de 3,9% par an en moyenne sur la période et le mix renouvelable devrait bientôt se diversifier en accueillant la filière photovoltaïque, aussi et surtout la filière des énergies biogazières.

Il existe donc un besoin de sources d'énergie alternatives, abordables et fiables pour combler le déficit énergétique au Cameroun. Les travaux de Vintila *et al.* [147] ont permis d'évaluer les rendements en bioconversion des résidus produits dans l'alimentation camerounaise à des biocarburants liquides et gazeux, ainsi que le potentiel de ces résidus comme matière première pour la production d'énergie renouvelable. Une étude de Muh *et al.* [141] passe en revue et évalue les perspectives et la durabilité de la production de biogaz au Cameroun. Pour ce faire, un bref aperçu des scénarios énergétiques au Cameroun, les bases de la production de biogaz et cette présente une évaluation du potentiel de ressources en biogaz du pays. Les résidus de culture se sont avérés être les substrats de biogaz les plus précieux dans le pays avec une capacité de production annuelle de $415,57 \times 10^6 \text{ m}^3$ contre une capacité de $10,52 \times 10^6 \text{ m}^3$ à partir de fumier animal. Cette étude montre également un avenir prometteur pour la production de biogaz au Cameroun, compte tenu de ses vastes et omniprésents stocks de matières premières agricoles. Toutefois, la prolifération de cette technologie dans

le pays est entravée par le manque d'institutions, de politiques, de réglementations, d'incitations, de volonté et d'engagements politiques, de techniciens et de des mécanismes de financement appropriés. La promotion de la production de biogaz au Cameroun se fait actuellement par des ONG locales et internationales avec des engagements limités de l'État.

Le potentiel de biomasse du pays est important et provient principalement de l'agriculture et de la forêt, la biomasse forestière couvrant près des 2/3 du territoire. L'utilisation de la biomasse traditionnelle (bois de chauffage) pour la cuisine et/ou l'éclairage par près de 99% de la population rurale camerounaise, compte tenu de ses effets sur la santé et l'environnement, a conduit au développement du programme national de biogaz domestique au Cameroun ("PNBD"), initié par l'organisation néerlandaise de développement ("SNV") du Cameroun et soutenu par le ministère de l'eau et de l'énergie [144, 148].

La SNV vise la mise à l'échelle des biodigesteurs domestiques, la promotion de digesteurs bon marché et faciles à utiliser, la promotion de l'utilisation efficace des effluents des digesteurs comme engrais organiques et dans l'utilisation du biogaz pour des applications commerciales (traitement du yaourt). Ce programme, a conduit aux études de faisabilité et à la construction de 105 digesteurs domestiques en 2010 et un atelier de suivi sur la promotion de marchés de biogaz viables dans le pays en 2012, ainsi que la construction d'environ 206 biodigesteurs dans les zones rurales du Cameroun 2013 [141]. Il existe également quelques campagnes de sensibilisation et des études réalisées pour promouvoir la technologie dans le pays. La SNV, en collaboration avec d'autres partenaires et organisations non gouvernementales (ONG) locales, participe activement au développement du secteur du biogaz au Cameroun, bien que les progrès, l'adoption et l'acceptation par les communautés locales soient timides. Même si la SNV et d'autres ONG locales ont continué à travailler pour développer le secteur du biogaz dans le pays, les efforts se sont principalement concentrés sur les petites installations domestiques. Quelques installations de biogaz à plus grande échelle méritent d'être mentionnées : les installations pilotes construites par la société camerounaise d'hygiène et d'assainissement ("HYSACAM") sur un site de décharge à Nkolfoulou-Yaoundé en 2011, et la deuxième au PK10 de Douala, construite en 2014 [149]. Il faut cependant noter que le biogaz de ces deux usines est brûlé à la torche en raison du manque d'infrastructure pour capter, purifier et conditionner le gaz pour son utilisation. Cependant, la société a récemment annoncé un programme de production de l'électricité à partir de ces sites de décharge [150]. La centrale de Nkolfoulou, d'une capacité estimée à 10 MW, traitera environ 360 000 tonnes de déchets par an mis en décharge sur le site. L'usine de PK10, dont la capacité est estimée à 60 MW, permettra de traiter 540 000 tonnes de déchets par an. Le troisième projet, qui sera situé à la décharge de Bafoussam dans la région de l'Ouest du Cameroun, aura d'une capacité de 2 MW et pourra traiter 75 000 tonnes de déchets par an. Depuis la construction de ces usines, elles ont énormément contribué à la réduction des émissions de gaz à effet de serre (méthane et dioxyde de carbone) provenant des décharges du pays [148, 149]. Une grande installation de traitement des eaux usées a également été construite à l'usine "Guinness" Cameroun Douala pour servir de traitement des déchets. Le biogaz de l'usine "Guinness" est également brûlé à la torche.

Au Cameroun, la recherche en matière de technique de production [151, 152] et de combustion du biogaz est encore à l'état embryonnaire et mérite d'être développer. Elle permettra de maîtriser et de contrôler les procédés chimiques, biochimiques et micro-biologiques de la production du biogaz d'une part. Et d'autre part, il sera possible d'analyser les constituants des différentes variantes du biogaz et d'élaborer leurs paramètres thermo-physiques.

Conclusion

Pour des besoins d'ingénierie industrielle, une bonne compréhension à la fois des mécanismes réactionnels et des procédés de conversion d'énergie est nécessaire. Cette compréhension passe par une étude rigoureuse

des flammes et de ses caractéristiques. La réduction d'une cinétique chimique complexe trouve aussi toute son importance dans l'optimisation du temps de calcul numérique pour la simulation des flammes. Le caractère turbulent doit être également pris en compte, puisque c'est un phénomène presque toujours présent dans les chambres réelles de combustion. L'utilisation d'un modèle de combustion turbulente, prenant en compte l'interaction chimie-turbulence est donc incontournable. Dans la dernière section nous avons présenté quelques avancés en ce qui concerne la production, la valorisation et la combustion des biogaz. Nous avons présenté les évolutions concernant les technologies associées à cette forme d'énergie au Cameroun. Le chapitre suivant présentera les modèles et les outils utilisés pour la réduction des mécanismes et la simulation de la combustion.

Chapitre 2

Chapitre 2

Modélisations, Méthodes et Outils

Introduction

Les études des phénomènes de la combustion, sont d'une importance capitale quand on sait qu'elles présentent de plus en plus beaucoup d'intérêts dans la recherche et offrent plusieurs applications dans divers domaines sociaux et industriels. Aux cœur de ces études, nous retrouvons entre autres la modélisation de la combustion intégrant le couplage entre la turbulence et la chimie, ainsi que l'amélioration et l'optimisation des mécanismes de cinétique chimique de combustion.

La modélisation physique peut se définir comme une représentation conceptuelle et simplifiée qui consiste à décrire un processus ou un phénomène à l'aide des expressions mathématiques. Un des enjeux tout aussi important de la modélisation est de simplifier les équations autant que possible afin de décrire le processus de manière toujours fidèle, tout en réduisant le temps de calcul. Dans la cinétique chimique, les processus d'optimisation sont conçus pour fournir une cinétique de base solide et également des meilleures prédictions, combinées aux propriétés de base de la combustion.

Dans ce chapitre, nous présentons les modèles de combustion à chimie non infiniment rapide utilisés dans ce travail : Eddy Dissipation Concept (EDC) et Partially Stirred Reactor (PaSR) et Steady Laminar Flamelet Model (SLFM). Nous présentons également les modèles de turbulence RANS et LES. Ces modèles sont utilisés pour valider la performance des mécanismes squelettiques dans les simulations numériques. Ces mécanismes sont obtenus grâce aux méthodes de réduction que nous décrivons dans la deuxième section de ce chapitre. Dans la troisième section, nous présentons les outils numériques employés dans le cadre de cette thèse. Enfin, une présentation des dispositifs expérimentales qui ont servi pour la validation de nos différents mécanismes et modèles est faite dans la quatrième section.

2.1 Modélisation de la Combustion Turbulente

2.1.1 Équations de l'Aérothermochimie

Equations instantanées

En effectuant le bilan de flux des variables conservatives ρ , ρu_i , ρe_t et ρY_k dans un système défini par un volume de contrôle V , on obtient le système d'équations aux dérivées partielles à résoudre, dites équations de Navier-Stokes étendues aux écoulements multi-espèces, exprimées ici dans une base cartésienne en espace x_i et temps t .

▷ Conservation de la masse

L'équation de transport pour la masse est :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0. \quad (2.1)$$

▷ Conservation de la quantité de mouvement

En considérant que les forces volumiques qui s'appliquent sur le fluide sont négligées, l'équation de la quantité de mouvement, pour les écoulements réactifs et non-réactifs sont formellement identiques et s'écrit :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.2)$$

avec τ_{ij} l'expression indicielle du tenseur des contraintes visqueuses $\underline{\tau}$.

En supposant le fluide Newtonien, la viscosité de volume est constante et le tenseur $\underline{\tau}$ est proportionnel au dérivateur A_{ij} du tenseur des taux de déformation :

$$\tau_{ij} = 2\mu A_{ij}, \quad (2.3)$$

avec μ la viscosité dynamique, reliée à la viscosité cinématique, ν , par la relation :

$$\nu = \frac{\mu}{\rho}, \quad (2.4)$$

où μ est la viscosité dynamique ; dans les codes de combustion, la viscosité dynamique est souvent calculée à l'aide de la formule de Sutherland [53] :

$$\mu = A_s \frac{\sqrt{T}}{1 + \frac{T}{T_s}}. \quad (2.5)$$

On exprime A_{ij} en utilisant le symbole de Kronecker $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ par :

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k}, \quad (2.6)$$

où μ est la viscosité dynamique et δ_{ij} est le symbole de Kronecker. Dans les codes de combustion, la viscosité dynamique est souvent calculée à l'aide de la formule de Sutherland.

▷ Conservation des espèces chimiques

C'est une équation écrite sous la forme instationnaire-convection-diffusion-source

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) = -\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho V_{k,j} Y_k) + \rho \dot{\omega}_k, \quad k = 1, N \text{ (nombre d'espèces)}. \quad (2.7)$$

La diffusion moléculaire des espèces chimiques, caractérisée par leur vitesse $V_{k,j}$, résulte de trois effets : le gradient des fractions massiques, le gradient de température (effet Soret) et le gradient de pression (effet baro-

diffusion). Les effets Soret et baro-diffusion étant négligés, on prendra :

$$V_{k,j}Y_k = -D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}. \quad (2.8)$$

Cette équation est plus connue sous le nom de Loi de Fick, où D_k est le coefficient de diffusion de l'espèce k . Le bilan des espèces s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \rho \dot{\omega}_k. \quad (2.9)$$

► Conservation de l'énergie totale

L'énergie totale du mélange est définie par : $e_t = h_t - p/\rho$ avec $h_t = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^N \nabla h_{f,k}^0 Y_k + \frac{1}{2} u_i u_i$. L'équation de bilan d'énergie totale s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j e_t) = \frac{\partial}{\partial x_j}(-J_j^{e_t} + \sigma_{ij} U_j) + \rho \dot{\omega}_{e_t}, \quad (2.10)$$

où $J_j^{e_t}$ est le flux d'énergie totale dans la direction j et $\dot{\omega}_{e_t}$ est le terme source de d'énergie totale. Le flux d'énergie totale dans la direction j s'écrit : $J_j^{e_t} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N h_k D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$ en considérant la partie de diffusion de chaleur par conduction (loi de Fourier) et la partie liée à la diffusion d'espèces, mais en négligeant la partie liée à la diffusion par gradient de concentration (effet Dufour) ainsi que le rayonnement. λ est la conductivité thermique du mélange.

► Loi des gaz parfaits

La loi des gaz parfaits est retenue comme la loi d'état. Cette loi peut donc s'écrire :

$$P = \rho \frac{R}{M} T = \rho(\gamma - 1) C_v T, \quad (2.11)$$

où M est la masse molaire du gaz considéré et $R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ la constante universelle des gaz parfaits. γ représente le rapport des chaleurs spécifiques, et C_v est la capacité calorifique du mélange à volume constant.

Equations moyennées

En combustion, les écoulements sont turbulents et présentent donc des caractères stochastique, d'où la nécessité de faire leur description statistique. Toutes les quantités fluctuantes sont divisées en une partie moyenne fluctuante,

$$U = \bar{U} + U', \quad (2.12)$$

où la barre montre que la quantité est moyennée, la prime indique la fluctuation.

Initialement appliquée aux cas des écoulements incompressibles pour moyenniser les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement, l'opération effectuée à l'équation (2.12) s'est également étendue aux écoulements compressibles. Les équations ainsi obtenues contiennent, comparativement à leurs instantanées, de nouveaux termes qui ont la forme de corrélations doubles de vitesse ou vitesse/masse volumique. La décomposition des quantités ρ et u_j est effectuée comme suit :

$$\rho = \bar{\rho} + \rho' \quad \text{et} \quad u_j = \bar{u}_j + u'_j \quad (2.13)$$

ce qui implique $\overline{\rho'} = 0$ et $\overline{u'_j} = 0$; si on applique cette décomposition comme premier aperçu à l'équation de conservation de la masse pour un écoulement à masse volumique variable, on obtient :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho u_j}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\rho' u'_j}) = 0. \quad (2.14)$$

Dans les écoulements avec gradients importants de densité, une moyenne pondérée par la masse, dite moyenne de Favre est souvent préférée [55]. Il établit cette moyenne d'abord pour le produit de la vitesse et de la masse volumique, puis plus tard à toutes les variables indépendantes. Elle est formulée statistiquement comme une moyenne temporelle ordinaire, en introduisant la fonction densité de probabilité jointe pour les deux variables ρ et f (une variable aléatoire), $P(\rho, f)$:

$$\tilde{P}(f) = \frac{1}{\rho} \int_0^\infty \rho P(\rho, f) d\rho. \quad (2.15)$$

Ainsi, les moyennes pondérées par la masse, les variances et corrélations d'ordres supérieurs peuvent être définies en utilisant cette fonction densité de probabilité :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} = \int f \tilde{P}(f) df \quad \text{et} \quad \widetilde{f'^2} = \frac{\overline{\rho f'^2}}{\bar{\rho}} = \int (f - \tilde{f})^2 \tilde{P}(f) df. \quad (2.16)$$

Il est donc possible d'envisager deux types de moyennes [82] :

- La moyenne statistique conventionnelle : $f = \bar{f} + f'$

$$\bar{f} = \frac{1}{t_M} \int f(t) dt \quad ; \quad \overline{f'} = 0. \quad (2.17)$$

- La moyenne pondérée au sens de Favre : $f = \tilde{f} + f''$

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad ; \quad \overline{f''} \neq 0. \quad (2.18)$$

En appliquant l'opérateur de filtrage aux équations de Navier-Stokes ainsi qu'à l'équation d'état, et en modifiant les termes inconnus de manière à faire apparaître des termes accessibles, on obtient les équations filtrées suivantes :

▷ **Conservation de la masse**

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0; \quad (2.19)$$

▷ **Conservation de la quantité de mouvement**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \widetilde{u''_i u''_j}); \quad (2.20)$$

▷ **Conservation de la fraction de mélange**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_k \frac{\partial Z}{\partial x_j}} - \bar{\rho} \widetilde{u''_j Z''} \right); \quad (2.21)$$

▷ Conservation des fractions massiques des espèces

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}} - \overline{\rho u_j'' Y_k''} \right) + \tilde{\omega}_k, \text{ avec } k = 1, N; \quad (2.22)$$

▷ Conservation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{e}_t) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_t) = \frac{\partial}{\partial x_j} [-(\bar{\rho} \tilde{u}_j'' e_t'') + \overline{\tau_{ij}'' (\tilde{u}_i'' + \tilde{u}_i)} - \overline{J_j^{e_t}}] + \bar{\rho} \tilde{\omega}_{e_t}; \quad (2.23)$$

La loi d'état thermodynamique filtrée s'écrit :

$$\bar{P} \simeq \bar{\rho} r \tilde{T}. \quad (2.24)$$

Fermeture des équations

Les équations de transport moyennées génèrent trois types de termes non fermés [153] à savoir :

- **Les contraintes de Reynolds** donnée par l'expression $\overline{\rho u_i'' u_j''}$ qui apparaît dans l'équation de la quantité de mouvement. La fermeture de ce terme doit être prise en compte par le modèle de turbulence, cela peut se faire directement par une relation algébrique (par exemple le modèle de Prandtl de longueur de mélange), où par des équations pour les contraintes de Reynolds (par exemple le modèle $k - \epsilon$). La majorité des modèles de turbulence sont développés pour les écoulements non réactifs et ne tiennent pas compte explicitement de l'effet du dégagement de la chaleur sur les contraintes de Reynolds.

- **Flux turbulents d'espèces $\overline{\rho u_j'' Y_k''}$ et d'enthalpie $\overline{\rho u_j'' h_t''}$** : qui apparaissent dans l'équation d'évolution des espèces et dans l'équation bilan d'énergie respectivement ; ces deux termes ouverts représentent les termes de transport turbulent d'énergie. Ces termes sont généralement fermés par une hypothèse de gradient :

$$\overline{\rho u_j'' Y_k''} = - \frac{\mu_t}{Sc_{T_k}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_j} \quad \text{et} \quad \overline{\rho u_j'' h_t''} = - \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}_t}{\partial x_j}, \quad (2.25)$$

avec μ_t la viscosité turbulente, estimée à partir du modèle de turbulence, Sc_{T_k} le nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce k et Pr_t le nombre de Prandtl turbulent.

- **Taux de réaction des espèces chimiques $\tilde{\omega}_k$** : Ce terme est fermé essentiellement par un modèle de combustion turbulente. Il fait l'objet d'investigation de nombreux travaux dédiés à la modélisation de la combustion turbulente. Sa fermeture par les modèles "PaSR", "EDC" et "flamelet", va être effectuée dans ce travail.

Description et Formulation du Modèle "PaSR"

La description des interactions chimie-turbulence représente l'une des tâches les plus difficiles dans la combustion turbulente ; il est nécessaire d'adopter un modèle robuste qui tient compte à la fois de la chimie et de la turbulence. Comme les autres modèles de combustion, le PaSR vise à déterminer le taux de production et de destruction des espèces $\tilde{\omega}_k$.

Dans ce modèle, la cellule de calcul est divisée en deux zones localement uniformes : l'une où les réactions ont lieu et l'autre caractérisée par le mélange uniquement. La concentration finale en espèces de la cellule est déterminée à partir de l'échange de masse entre les deux zones, entraîné par la turbulence. Un dessin conceptuel, illustratif du modèle PaSR, est présenté à la figure 2.1a.

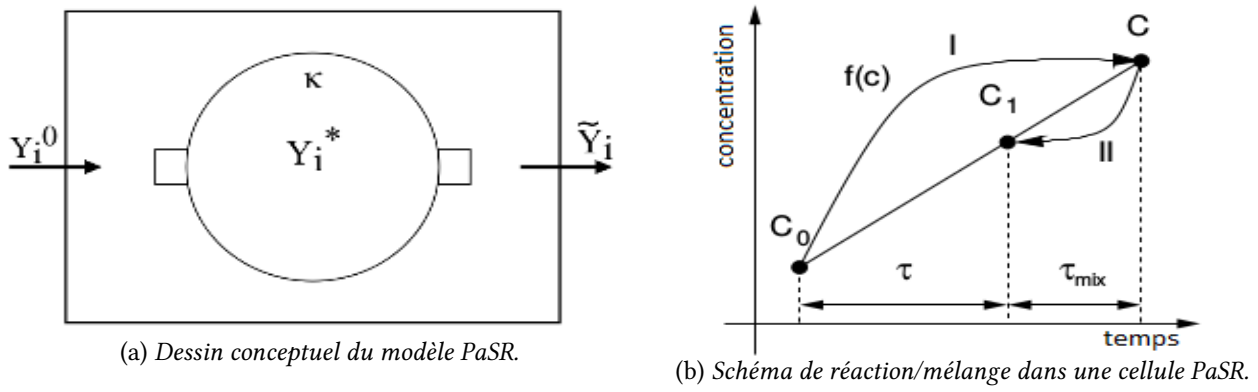


FIGURE 2.1 – Schémas décrivant le modèle de combustion PaSR.

Conçu comme une extension de l'approche EDC [65], le modèle de combustion PaSR (Partial Stirred Reactor), stipule comme précisé précédemment, que chaque cellule de calcul est divisée en deux zones : une zone de réaction et une autre de non-réaction. La zone de réaction est une composition homogène qui peut être traitée comme un PSR (Perfectly Stirred Reactor). La relation qui lie les concentrations (c_0 , c et c_1) au sein de la cellule de calcul est écrite comme suit [154] :

$$c_1 = \kappa c + (1 - \kappa)c_0. \quad (2.26)$$

Dans cette relation, c_0 est la concentration dans le flux d'alimentation de la cellule ou la concentration initiale de la cellule. De même, c , est la concentration inconnue dans la zone de réaction, c_1 , quant à lui, est la concentration de sortie de la cellule, et κ , la fraction massique du mélange qui réagit.

Les fractions réactives κ_i dépendent à la fois de l'échelle de temps chimique τ_{ch} et de l'échelle de temps de micro-mélange τ_{mix} , tel que si $\tau_{ch} \gg \tau_{mix}$, alors $\kappa_i \approx 1$ et s'approchent de 0 dans le cas où $\tau_{ch} \ll \tau_{mix}$, ce qui signifie que le mélange est efficace, et que la composition finale est principalement déterminée par la chimie. Cette fraction massique réactive s'exprime donc de la façon suivante [154, 155] :

$$\kappa_i = \frac{\tau_{ch}}{\tau_{mix} + \tau_{ch}}, \quad (2.27)$$

où :

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \varepsilon}}. \quad (2.28)$$

ici, C_{mix} est la constante du taux de mélange du modèle et $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$, avec μ la viscosité dynamique et μ_t la viscosité turbulente. L'ensemble du processus peut être décrit en deux étapes ; dans la première étape, la concentration initiale dans la zone de réaction change de c_0 à c , dans la seconde étape, la concentration réactive c se mélange avec la concentration non réactive c_0 par turbulence disponible dans la cellule pour produire la concentration de sortie c_1 . La durée de conversion de c_0 en c_1 est appelée le temps d'intégration, τ , et comme la turbulence mélange c_0 avec c , le temps entre c et c_1 est noté temps caractéristique de la turbulence, τ_{mix} . τ_{ch} est le temps de séjour minimum qui entretient la combustion et est calculé en résolvant l'équation :

$$\frac{1}{\tau_{ch}} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial Y}. \quad (2.29)$$

La vitesse de réaction moyenne pour l'espèce i est donnée par l'expression suivante [154, 155] :

$$\tilde{\dot{\omega}}_i = \kappa_i \dot{\omega}_i, \quad (2.30)$$

où $\dot{\omega}_i$ est la vitesse de réaction de l'espèce i selon le mécanisme cinétique utilisé. Elle est exprimée comme il suit :

$$\dot{\omega}_i = \frac{\tilde{\rho}(Y_i^* - Y_i^0)}{\tau^*}. \quad (2.31)$$

Le réacteur partiellement agité présente les avantages de l'EDC avec en plus le fait de pouvoir diviser une cellule de calcul en une partie réactive et non réactive. Ceci est particulièrement important pour une utilisation dans les simulations industrielles où la taille du maillage est souvent un facteur limitant. En prenant en compte à la fois le mélange et l'échelle de temps chimique, le modèle PaSR peut être utilisé sur une large gamme d'écoulements réactifs sans connaissance «a priori» du type d'écoulement.

Description et formulation du modèle Eddy Dissipation Concept (EDC)

S'inspirant du modèle Eddy Break Up (EBU), le modèle Eddy Dissipation Concept (EDC) a été introduit par Magnussen [65] et développé avec d'autres auteurs [156–158]. Il permet une bonne modélisation de l'interaction entre la réaction et la turbulence, où la vitesse de réaction globale est contrôlée par le mélange turbulent. Il est utilisé avec succès pour la modélisation de la combustion dans une grande variété de configurations de combustion. Le modèle suppose que la plupart des réactions ont lieu dans des structures à turbulences fines, qui sont modélisées comme des réacteurs parfaitement mélangés. Pour sa mise en œuvre, nous devons connaître la fraction massique de la réaction et le taux de transfert de masse entre les structures fines et le fluide environnant. Ce modèle est applicable aux flux où la cinétique chimique n'est pas négligeable pour le mélange turbulent. Il a été l'un des premiers modèles capables de traiter les flammes diffusives turbulentes, ce qui lui a valu d'être largement utilisé dans de nombreux codes CFD tel que le code OpenFOAM. Ce modèle suppose que les réactions chimiques ne se produisent que dans des structures fines turbulentes si les conditions sont favorables.

Les structures fines sont caractérisées par leur fraction de masse dans la cellule de calcul :

$$\gamma^* = 4.6 \left(\frac{\nu \tilde{\varepsilon}}{k^2} \right)^{1/2}, \quad (2.32)$$

où ν est la viscosité cinématique. Le transfert de masse entre les structures fines et les tourbillons turbulents environnants \dot{m}^* est calculé comme suit :

$$\dot{m}^* = 11.2 \frac{\tilde{\varepsilon}}{k}. \quad (2.33)$$

Le taux de réaction $\tilde{\omega}_k$ est exprimé comme suit :

$$\tilde{\omega}_k = \frac{\bar{\rho} \dot{m}^* \chi}{1 - \gamma^* \chi} (\tilde{Y}_k - \tilde{Y}_k^*), \quad (2.34)$$

où \tilde{Y}_k et \tilde{Y}_k^* sont respectivement la fraction massique moyenne et la fraction massique des structures fines de l'espèce k . La probabilité d'inflammation χ est la fraction des structures fines qui peuvent réagir. La fraction massique moyenne \tilde{Y}_k est obtenue en résolvant l'équation de conservation des espèces (Eq.2.22).

Les différentes modifications de l'EDC telles que implémentées dans OpenFOAM, sont présentées et comparées avec plus de détail dans l'article de Bosenhofer *et al.* [159] à savoir : la version "EDC-1981" qui est la version originale du modèle EDC, en suite, les versions "EDC-1996", "EDC-2005" et "EDC-2016". Dans ce travail, nous utilisons la version 2005 pour nos simulations.

La principale différence entre le modèle PaSR et le modèle EDC est la méthode de simulation de la fraction volumique de κ^* la structure à échelle fine et de l'échelle de temps de mélange τ_{mix} . Le premier combine l'échelle de temps de Kolmogorov et l'échelle de temps de la réaction chimique, en adoptant généralement la

formule proposée par Sabelnikov et Fureby [160]. Le modèle EDC suppose quant à elle que la turbulence est approximativement isotrope, la fraction volumique de la structure à échelle fine s'écrit comme présenté par l'équation 2.32.

Description du Modèle "Flammelette"

Un autre modèle de combustion turbulente utilisé dans cette thèse est une variante des modèles flammelettes nommé en anglais par "Steady Laminar Flamelet Model" (SLFM) [17]. Il repose sur l'hypothèse que la flamme dans un écoulement turbulent peut à tout moment être considérée comme un ensemble de petites flammes à diffusion laminaire, généralement appelées "flammelettes". Cette hypothèse est justifiée lorsque le nombre de Damköhler est important, c'est-à-dire lorsque la zone de réaction chimique est mince par rapport aux échelles de longueur turbulente. Dans cette limite, la SLFM est une approche largement utilisée qui permet à l'utilisateur de prendre en compte les effets de la chimie à taux fini avec un effort de calcul raisonnable. Son principal avantage est que les flammelettes, qui décrivent la structure locale de la flamme turbulente, sont couplées à l'écoulement turbulent par seulement quelques paramètres. En pratique, ce fait est utilisé pour calculer les flammelettes indépendamment de l'écoulement turbulent dans une étape de prétraitement et les stocker dans une "bibliothèque de flammelettes". Les propriétés thermodynamiques et les fractions massiques des espèces peuvent ensuite être extraites de ces tableaux en utilisant des paramètres représentatifs qui sont transportés dans le code de turbulence.

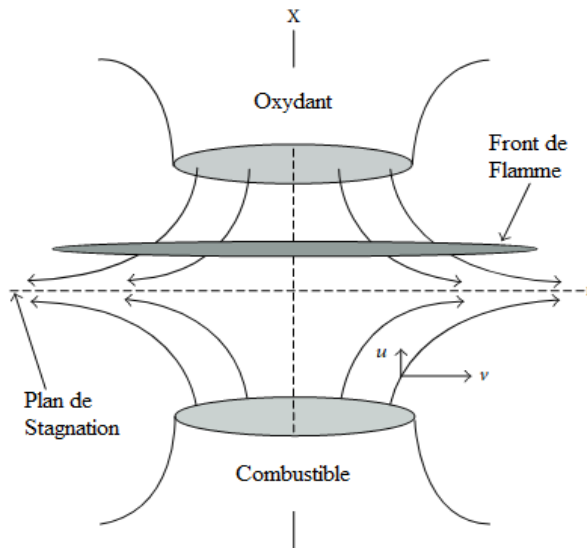


FIGURE 2.2 – Vue schématique d'une flamme à contre-courant.

Dans ce travail, les flammes sont générées en utilisant une configuration de flamme de diffusion à contre-courant (voir figure 2.2). L'oxydant et le combustible s'écoulent par des entrées opposées et forment en leur milieu une flamme de diffusion qui, le long son axe central, peut être réduit à un problème unidimensionnel. La température, la composition des espèces aux buses ainsi que la pression de fonctionnement est choisie pour correspondre à la configuration utilisée dans le code turbulent. Ce type de flamme est généralement décrit en utilisant la fraction de mélange Z qui est une mesure pour la quantité d'atomes de carburant dans un mélange donné. Par définition, elle est de 1 à l'entrée du combustible et de 0 à l'entrée de l'oxydant. Les équations gouvernant les fractions de température et de masse des espèces de la flamme dans l'espace de la fraction de mélange peut alors être obtenu en appliquant une transformation de coordonnées, comme le montre Peters [70]. Pour les diffusions ($Le = 1$), les équations des flammelettes peuvent s'écrire :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} - \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \dot{\omega}_k = 0 \tag{2.35}$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{2} \rho \chi \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \right) + \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^n h_k \dot{\omega}_k = 0 \quad (2.36)$$

où ρ est la densité thermodynamique, Y_k est la fraction massique de l'espèce chimique, T désigne la température, c_p et h_k sont respectivement la capacité thermique isobare spécifique et l'enthalpie spécifique de l'espèce k .

Les termes sources des espèces chimiques $\dot{\omega}_k$ sont calculés à l'aide d'un mécanisme de réaction chimique. Le taux de dissipation scalaire χ peut être considéré comme une échelle de temps de diffusion inverse et a la dimension 1/s.

χ est une fonction de la fraction du mélange, mais peut, comme le montre Peters [71], être paramétrée par sa valeur au mélange stœchiométrique χ_{st} . Par conséquent, χ_{st} agit comme un paramètre externe qui impose une contrainte sur la flamme et définit sa structure. Dans les travaux actuels, les flamelets sont calculés avec le logiciel de chimie open-source Cantera [161] où le taux de dissipation scalaire est ajusté en définissant le débit massique aux deux entrées. En commençant avec un faible débit massique, plusieurs flammelettes peuvent être calculées en augmentant progressivement le débit massique et la contrainte imposée jusqu'à ce que la limite d'extinction soit atteinte. Une fois que la solution des équations de la flamme est connue pour un nombre suffisant de χ_{st} , la température ainsi que les fractions massiques des espèces peuvent être tabulées en fonction de la fraction du mélange et du taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie ($T(Z, \chi_{st}), Y_k(Z, \chi_{st})$).

Les valeurs moyennes de la fraction massique et de la température des espèces sont ensuite calculées à l'aide d'une fonction de densité de probabilité présumée de Favre (PDF) pour intégrer les "flamelets". Elles sont données par les équations suivantes :

$$\tilde{Y}_k = \int_0^\infty \int_0^1 Y_k(Z, \chi_{st}) P(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st}, \quad (2.37)$$

$$\tilde{T} = \int_0^\infty \int_0^1 T(Z, \chi_{st}) P(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st}. \quad (2.38)$$

Cette étape est réalisée avec le nouvel utilitaire OpenFOAM canteraToFoam. Ici, le PDF conjoint $P(Z, \chi_{st})$ est décomposé en supposant une indépendance statistique :

$$P(Z, \chi_{st}) = P(Z)P(\chi_{st}). \quad (2.39)$$

La forme du PDF pour le taux de dissipation scalaire est modélisée avec une simple fonction de Dirac $P(\chi_{st}) = \delta(\chi_{st} - \widetilde{\chi_{st}})$. Pour la fraction de mélange, la forme de la PDF utilisée est la β – PDF présumée donnée comme suit :

$$P(Z) = Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)}. \quad (2.40)$$

Γ est la fonction gamma, α et β sont les paramètres β – PDF définissant sa forme en fonction de la fraction moyenne du mélange Z et de sa variance $\widetilde{Z''^2}$.

Une grande partie du calcul thermodynamique dans OpenFOAM est basée sur l'enthalpie sensible h_s , à partir de laquelle la température et d'autres grandeurs thermodynamiques sont dérivées. Ainsi, afin d'être cohérent avec le standard OpenFOAM et d'être flexible en terme de modélisation thermodynamique, l'utilitaire canteraToFoam calcule l'enthalpie à partir de la température donnée. L'ensemble des modèles thermodynamiques d'OpenFOAM est disponible pour cette étape. Après l'intégration PDF et le calcul de h_s , les valeurs

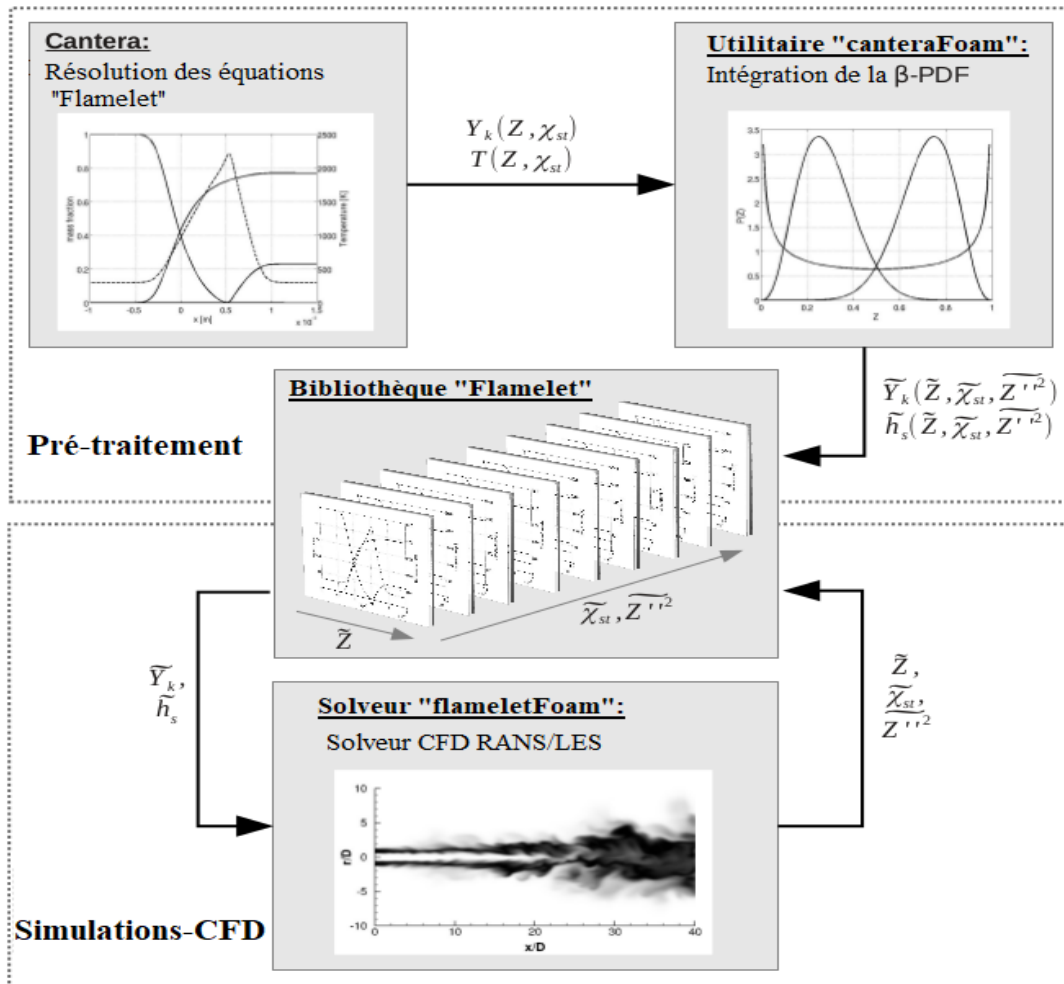


FIGURE 2.3 – Schéma de la procédure SLMF mise en œuvre.

moyennes de la fraction massique d'espèce Y_k et de l'enthalpie h_s sont stockées dans la «bibliothèque flamelet» en fonction des valeurs moyennes de la fraction de mélange \tilde{Z} , de la variance de la fraction de mélange $\widetilde{Z''^2}$ et du taux de dissipation scalaire à mélange stœchiométrique χ_{st} . Ces trois quantités doivent être fournies par le code CFD turbulent, de sorte que la composition des espèces et l'enthalpie peuvent être obtenues à partir de la bibliothèque par interpolation. Cette fonctionnalité a été implémentée dans le nouveau solveur OpenFOAM basé sur la pression flameletFoam pour les simulations LES et RANS. Les détails de l'approche de modélisation dépendent de la fermeture de turbulence.

Dans le contexte du RANS, deux équations de transport supplémentaires pour la fraction moyenne du mélange et sa variance doivent être résolues comme suit :

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right), \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \widetilde{Z''^2}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{u}_j \widetilde{Z''^2}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu_{eff} \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_j} \right) + 2\mu_{eff} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 - \tilde{\rho} \tilde{\chi}. \quad (2.42)$$

Ici, la viscosité effective est composée d'une contribution laminaire et turbulente ($\mu_{eff} = \mu + \mu_t$). La viscosité turbulente est calculée avec un modèle de turbulence qui peut être choisi parmi la variété de modèles disponibles dans OpenFOAM. En supposant que les fluctuations de la fraction de mélange se désintègrent de manière proportionnelle aux fluctuations turbulentes, le taux de dissipation scalaire dans l'équation 2.42 peut

être exprimé comme suit

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{Z''^2}, \quad (2.43)$$

où k et ε désignent respectivement l'énergie cinétique turbulente et sa dissipation. La constante C_χ prend la valeur 2.0.

Dans le contexte LES, l'équation de transport filtrée pour la fraction de mélange semble formellement identique à l'équation de transport moyennée de Reynolds (voir l'équation 2.41). Cependant, la viscosité effective est maintenant composée d'une contribution résolue et d'une partie qui est due aux fluctuations non résolues de l'échelle de sous-réseau (SGS) ($\mu_{eff} = \mu + \mu_{sgs}$). Ce dernier nécessite une modélisation et peut être décrit par les modèles de turbulence SGS disponibles dans OpenFOAM. Sous l'hypothèse d'équilibre local, la variance de la fraction de mélange SGS $\widetilde{Z''^2}$ et le taux de dissipation scalaire filtré $\tilde{\chi}$ sont modélisés selon l'approche qui a été proposée par Pierce et Moin [162].

$$\widetilde{Z''^2} = C_Z \Delta^2 \left\| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right\|^2, \quad (2.44)$$

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\mu_{eff}}{\bar{\rho}} \left\| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right\|^2. \quad (2.45)$$

Moin *et al.* [163] ont proposé une procédure dynamique pour déterminer la constante C_Z . Cependant, pour l'implémentation actuelle, une valeur constante de 1,0 s'est avérée suffisante. Une simplification supplémentaire de la mise en œuvre actuelle est apportée concernant le conditionnement de la vitesse de dissipation scalaire sur mélange stœchiométrique. Les "flammelettes" de la bibliothèque sont caractérisés par χ_{st} , tandis que seule la valeur non conditionnée peut être calculée avec l'équation 2.43 et l'équation 2.45. Entre autres, Pitsch *et al.* [164] ont développé un modèle qui utilise une forme présumée PDF pour relier le taux de dissipation scalaire inconditionné χ à sa valeur au point de stœchiométrie χ_{st} . Cependant, il est rapporté [17] qu'en pratique l'approximation $\chi = \chi_{st}$ est acceptable car l'erreur est faible autour du mélange stœchiométrique, qui est le centre d'intérêt. De plus, la modélisation du taux de dissipation scalaire conditionné introduit des incertitudes supplémentaires. Pour ces raisons, le taux de dissipation scalaire non conditionné est utilisé dans l'implémentation actuelle pour extraire les fractions massiques d'espèces et l'enthalpie sensible de la «bibliothèque de flammelette». La procédure SLFM telle que la mise en œuvre dans les travaux actuels est également illustrée sur la figure 2.3.

2.1.2 Les Modèles de Turbulences

Modèles RANS

▷ Équations du modèle $k - \varepsilon$ Standard

Ce modèle utilise le principe de la viscosité turbulente μ_t qui est une propriété du champ de l'écoulement turbulent et pas du mélange gazeux. Par analyse dimensionnelle, μ_t est reliée à l'échelle intégrale l_t et à la fluctuation de la vitesse u'_t par :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \quad \text{avec} \quad C_\mu = 0.09, \quad (2.46)$$

où ε est le taux de dissipation turbulent de k .

Si on admet une isotropie locale de la turbulence, l'équation de transport de k est obtenue par sommation

de la trace du tenseur de contrainte de Reynolds :

$$\frac{\partial \bar{\rho}k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}u_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + \overline{\bar{\rho}u_i'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \bar{\rho}\varepsilon. \quad (2.47)$$

L'équation de transport de ε peut être modélisée analogiquement à celle de k donnant :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}u_j \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) - C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \overline{u_i'' u_j''} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (2.48)$$

Les constantes du modèle standard $k - \varepsilon$ sont données dans le tableau 2.1.

Tableau 2.1 – Paramètres constants du modèle turbulence $k - \varepsilon$ standard.

Paramètres du modèle $\varepsilon - k$	C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
valeur de la constante	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

▷ Équations du modèle RNG (Renormalization Group theory) $k - \varepsilon$

Les équations du modèle RNG $k - \varepsilon$ sont différentes de celles du modèle standard $k - \varepsilon$, par un terme supplémentaire dans l'équation ε . Ce terme prend en compte l'interaction entre la dissipation de la turbulence et le cisaillement moyen, ce qui permet de modéliser efficacement l'effet du tourbillon sur la turbulence. Il permet ainsi d'améliorer les prévisions de la forte courbure des lignes d'écoulement et du taux de déformation ainsi que la simulation des écoulements transitoires, de la chaleur des parois et du transfert de masse [97]. Les équations de transport pour le modèle RNG $k - \varepsilon$ sont données comme suit :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{k}) = P_k + \nabla \cdot (\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \nabla \tilde{k}) - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon}, \quad (2.49)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot (\alpha_k \mu_{eff} \nabla \tilde{k}) + \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho}\tilde{\varepsilon}) - R_e. \quad (2.50)$$

Tous les termes des équations précédentes sont similaires au modèle standard, sauf pour α_ε et α_k qui sont les inverses du nombre de Prandtl pour ε et k , respectivement. Le terme supplémentaire dans le modèle RNG $k - \varepsilon$, est donné par $R_e = \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{k}$ où $\eta \equiv S_k/\varepsilon$, $\eta_0 = 4.38$, $\beta = 0.012$. Pour plus de détails sur la théorie du RNG et ses applications, voir [97].

▷ Realizable $k - \varepsilon$ Model

L'équation de l'énergie cinétique turbulente de ce modèle est la même que celle du modèle standard $k - \varepsilon$. Il comprend en outre une formule de viscosité turbulente et une équation de modèle de dissipation basée sur l'équation dynamique de la fluctuation du tourbillon de la moyenne quadratique. C_μ est calculé en fonction de k et ε a la valeur 0,09. Les constantes du modèle C_2 , σ_k et σ_ε ont respectivement la valeur 1,9, 1 et 1,2. Les équations de transport pour le modèle réalisable $k - \varepsilon$ sont données comme suit :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{k}) = P_k + \nabla \cdot \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right] \nabla \tilde{k} \right) - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon}, \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right] \nabla \tilde{\varepsilon} \right) + \rho C_1 S_\varepsilon - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}}. \quad (2.52)$$

ici, $C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right]$; $\eta = S \frac{k}{\varepsilon}$; $S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$, C_μ est calculé comme suit $C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{U^* k}{\varepsilon}}$ où U^* est une fonction des gradients de vitesse et A_0 , A_s sont des constantes.

▷ Équation du modèle $k - \omega$ Shear Stress Transport (SST)

La variante OpenFOAM est basée sur [165]. Ce modèle combine à la fois la formulation de Wilcox $k - \omega$ [166] dans les parties internes de la couche limite (près du mur) et le modèle $k - \varepsilon$ dans le flux libre. Elle tient compte du transport de la contrainte de cisaillement turbulente et peut être utilisée directement jusqu'à la paroi à travers la sous-couche visqueuse. Le modèle $k - \omega$ SST peut donc être utilisé comme un modèle de turbulence à faible nombre de Reynolds sans fonction d'amortissement supplémentaire. Les équations de transport pour ce modèle sont les suivantes :

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{k}) = \bar{P}_k + \nabla \cdot (\Gamma_k \nabla \tilde{k}) - \gamma_k, \quad (2.53)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\omega})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{\omega}) = P_\omega + D_\omega + \nabla \cdot (\Gamma_\omega \nabla \tilde{\omega}) - \gamma_\omega, \quad (2.54)$$

où \bar{P}_k est la production de l'énergie cinétique de turbulence et est calculé par $\bar{P}_k = \min(P_k, 10\rho\beta^*k\omega)$. Ici, P_k est le même que dans le modèle $k - \varepsilon$ standard. Les autres termes (Γ_k , Γ_ω , D_ω , γ_k and γ_ω) sont définis par Menter [165].

Modèle LES

Dans OpenFOAM, le schéma LES avec le filtrage implicite est implémenté, dans lequel seulement la largeur du filtre est spécifiée et la forme du filtre ne l'est pas. Dans ce cas, l'élimination du mouvement à petite échelle et donc le calcul de la moyenne est effectué principalement par la grille numérique, car sur une grille donnée, seuls les mouvements dont l'échelle est supérieure à la taille de la maille peuvent être résolus; les autres passent à travers la maille et la quantité calculée est une moyenne sur le volume de contrôle formé par la grille [167]. En revanche, dans le cas d'un filtrage explicite, une fonction filtre séparée est introduite avec une largeur filtrée Δ .

L'application de l'opération de filtrage aux équations de Navier-Stokes conduit aux équations filtrées suivantes :

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \bar{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_i \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}, \quad (2.56)$$

où l'opération de filtrage est effectuée implicitement, le vecteur espace est défini par $x_i \equiv x_1, x_2, x_3$, et le vecteur vitesse par $u_i \equiv u_1, u_2, u_3$. Ici, τ_{ij} est le tenseur des contraintes à l'échelle de la sous-maille, défini comme suit.

$$\tau_{ij} = \widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j, \quad (2.57)$$

qui représente une partie inconnue dans les équations filtrées qui doit être modélisée.

Le modèle Smagorinsky subgrid scale (SGS) a été développé par Joseph Smagorinsky dans la communauté météorologique dans les années 1960 [105]. Il est basé sur l'hypothèse de viscosité turbulente, qui postule une

relation linéaire entre la contrainte de cisaillement SGS et le taux de tenseur de déformation résolu. Le tenseur d'échelle de sous-grille est :

$$\tau_{ij}^{SGS} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j = \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} + (\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}), \quad (2.58)$$

où le tenseur d'échelle sous-grille est divisé en une partie isotrope $\frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}$ et une partie anisotrope $\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}$ par analogie avec le tenseur de contraintes de Reynolds dans l'approche RANS.

Ensuite, toujours comme dans l'approche RANS, l'hypothèse de Boussinesq peut être introduite afin de modéliser la partie déviatorique du tenseur des contraintes sous-grille. De cette façon, on suppose que les contraintes turbulentes se comportent formellement comme les contraintes visqueuses :

$$\tau_{ij}^{SGS} = \widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u}_i \widetilde{u}_j = \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} + (\tau_{ij}^{SGS} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij}) = \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} - 2\nu_{SGS} dev(\overline{S_{ij}}). \quad (2.59)$$

Dans l'équation ci-dessus, S_{ij} est le tenseur de vitesse de déformation à l'échelle résolue et est défini comme :

$$\overline{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.60)$$

La viscosité turbulente est ensuite calculée à partir de l'équation suivante, qui suit le principe déjà adopté dans RANS où la viscosité s'échelonne avec une échelle de longueur et de vitesse :

$$\nu_{SGS} = C_k \Delta \sqrt{k_{SGS}}, \quad (2.61)$$

où $C_k = 0,094$ est la valeur par défaut et on a $k_{SGS} = \frac{1}{2} \tau_{kk}$.

La partie restante est le calcul de l'énergie cinétique du sous-réseau. Dans le modèle de Smagorinsky [105], cela est calculé sous l'hypothèse de l'équilibre entre la production et la dissipation d'énergie à l'échelle du sous-réseau (équilibre local) :

$$\overline{S} : \tau_{ij}^{SGS} + C_\varepsilon \frac{k_{SGS}^{1.5}}{\Delta} = 0. \quad (2.62)$$

Après quelques opérations, la viscosité à l'échelle de la sous-grille est donnée par :

$$\nu_{SGS} = (C_s \overline{\Delta})^2 \sqrt{2 \overline{S_{ij}} \overline{S_{ij}}}. \quad (2.63)$$

La seule constante nécessaire est la constante de Smagorinsky C_s et est généralement comprise entre 0,1 et 0,2. Dans OpenFOAM, la valeur par défaut est 0,168. Une description plus détaillée du schéma LES tel qu'implémenté est présenter Montecchia *et al.* [168].

2.1.3 Modélisation du rayonnement

La modélisation du rayonnement est réalisée par l'approximation P-1. Le modèle de rayonnement P-1 est le cas le plus bas du modèle P-N (ou harmoniques sphériques); il suppose qu'une flamme est optiquement mince [169]. Pour un gaz gris, la perte de chaleur par rayonnement, \bar{q}_r est calculée comme suit :

$$\bar{q}_r = \Gamma \cdot \nabla G, \quad (2.64)$$

où G est le rayonnement incident et

$$\Gamma = \frac{-1}{(3(a + \sigma_s) - C\sigma_s)}. \quad (2.65)$$

L'équation de transport de G est donné par :

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - aG + 4an^2\sigma T_g^4 = S_G. \quad (2.66)$$

Où σ_s est le coefficient de diffusion, n est l'indice de réfraction du milieu, T_g est la température du gaz et S_G est la source de rayonnement définie par l'utilisateur. La combinaison des équations (13) et (15) donne l'expression du flux de chaleur radiatif,

$$-\nabla \bar{q}_r = aG - 4an^2\sigma T_g^4, \quad (2.67)$$

où a est le coefficient d'absorption (m^{-1}), $e = an^2$ est le coefficient d'émission et σ est la constante de Stefan-Boltzmann. Le coefficient d'absorption et le coefficient d'émission sont calculés à l'aide d'un modèle à somme pondérée des gaz gris "en anglais : a weighted-sum-of-gray-gases", en fonction des concentrations locales de CO_2 et H_2O , de la longueur du trajet et de la pression. Les facteurs de pondération de l'émissivité pour le CO_2 et H_2O proviennent de Smith *et al.* [170].

2.2 Méthodes de réduction des mécanismes détaillés aux mécanismes squelettiques

2.2.1 Principes de base

Au Chapitre 1 à la section 1.2.2, le rôle des mécanismes détaillés et l'importance de la réduction des mécanismes ont été présenté. En général, pour mieux comprendre la chimie de la combustion, des mécanismes de réaction de plus en plus détaillés ont été développés. Les chimistes, en particulier, sont fortement engagés dans cette branche de la science et de la recherche. Cependant, du point de vue de l'ingénierie, il faut des mécanismes de réaction relativement petits mais performant qui peuvent être utilisés, par exemple, dans les calculs CFD des processus de combustion qui se déroulent dans des géométries spatiales tridimensionnelles complexes, le plus souvent turbulents et souvent transitoires. Un mécanisme de réaction doit être suffisamment petit pour permettre des calculs dans une période de temps CPU raisonnable et, en même temps, suffisamment grand pour pouvoir refléter des caractéristiques importantes du processus de combustion ou d'allumage étudié telles que les structures de flamme, les vitesses de flamme, les temps d'allumage et de retard, ou l'extinction de la flamme. Les mécanismes dits "réduits" visent à satisfaire ces deux exigences. Les méthodes de dérivation des mécanismes réduits sont présentées et discutées dans ce chapitre. En particulier, des méthodes de réduction sont discutées et développées qui se prêtent à un traitement numérique, permettant ainsi des procédures de réduction assistées par ordinateur.

Pour un problème de combustion non prémélangée de méthane dans l'air, un mécanisme détaillé de réactions élémentaires n'est pas unique. Le mécanisme peut plutôt contenir plus ou moins de réactions en fonction des détails de la solution requise pour l'étude particulière. Par exemple, si la simulation d'une telle flamme de diffusion ne doit être précise que pour une région étroite dans l'ensemble de l'espace des paramètres, par exemple seulement pour les basses mais pas les hautes pressions, et si la formation de suie n'est pas intéressante pour l'enquêteur, alors un mécanisme détaillé relativement court, c'est-à-dire un mécanisme comprenant peut-être seulement 20 ou 30 réactions chimiques plutôt que des centaines, pourrait suffire. Si, toutefois, les simulations doivent également donner des résultats physiquement significatifs à des pressions élevées, par exemple, ou proches de l'extinction des flammes, alors un mécanisme chimique sensiblement plus important est nécessaire pour donner des résultats réalistes qui peuvent par exemple suivre la précision des données obtenues expérimentalement.

Ainsi, pour un même problème physique de combustion, il existe - généralement - de nombreux mécanismes de réaction alternatifs plus ou moins détaillés. À ce stade, il convient de définir ce qu'on appelle un mécanisme squelettique. Un mécanisme squelettique est défini pour (i) un problème physique de combustion donné dans des conditions données, spécifiées, par exemple à des pressions basses éloignées des conditions d'extinction, et (ii) pour des quantités cibles données. Les quantités cibles peuvent être, par exemple, des températures de flamme maximales ou des structures de flamme en termes de profils de concentration des espèces stables et des principaux intermédiaires de réaction. Par exemple, dans le cadre de la combustion combustible/air, les flammes de diffusion méthane/air calculées dans la présente thèse nécessitent la prédiction de températures maximales raisonnables pour tous les taux de déformation ainsi que des structures de flamme raisonnables pour les principales espèces ce sont les réactifs CH_4 et O_2 , les produits stables H_2O et CO_2 , ainsi que le CO et, dans une certaine mesure, les espèces radiaux, c'est-à-dire H , O et OH . Ainsi donc, un mécanisme squelettique peut être défini comme le plus petit mécanisme détaillé de réactions élémentaires qui, pour un problème de combustion donné et des quantités cibles spécifiées, donne encore des résultats "raisonnablement précis". Ici, l'adjectif "*raisonnablement précis*" n'est pas strictement défini, bien sûr.

Dans la suite de cette section, les méthodes permettant de dériver un mécanisme squelettique à partir d'un mécanisme plus détaillé de réactions élémentaires sont présentées et discutées.

2.2.2 Méthode "Directed Relation Graph" (DRG)

Pour se conformer à la notation de la littérature actuelle [32,34,35,47], dans cette section les espèces seront désignées par des lettres majuscules A , B , etc. Le taux molaire de production des espèces A dans un système de combustion donné est $\sum_{i=1}^I \nu_{A,i} \omega_i$, où ω_i indique le taux de réaction i , $i = 1, \dots, I$. Chaque terme $\nu_{A,i} \omega_i$ de cette somme apporte une contribution positive, négative ou nulle au taux de production des espèces A . Par conséquent, la somme peut être considérée comme une mesure brute de l'activité chimique impliquée dans la production d'espèces A à partir de toutes les réactions I ,

$$\sum_{i=1}^I |\nu_{A,i} \omega_i|.$$

De même, pour une espèce $B \neq A$, la somme est

$$\sum_{i=1}^I |\nu_{A,i} \omega_i \delta_{B,i}|,$$

où

$$\delta_{B,i} = \begin{cases} 1 & \text{si l'espèce } B \text{ participe à la réaction } i, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.68)$$

peut être considéré comme une mesure brute de l'activité chimique impliquée dans la production d'espèces A à partir des seules réactions auxquelles B participe en tant que réactif, produit, inerte ou comme un tiers élément. Par conséquent, le coefficient

$$r_{AB} = \frac{\sum_{i=1}^I |\nu_{A,i} \omega_i \delta_{B,i}|}{\sum_{i=1}^I |\nu_{A,i} \omega_i|}, \quad (2.69)$$

est une mesure de la déviation du taux de production des espèces A si les espèces B sont retirées du système, c'est-à-dire si du mécanisme de réaction toutes les réactions auxquelles les espèces B participent sont retirées.

Évidemment, $0 \leq r_{AB} \leq 1$ et, plus r_{AB} est petit, plus l'effet de B sur le taux de production des espèces A est faible.

Dans les travaux [32–35], Il a été développé par LU une stratégie systématique basée sur les coefficients r_{AB} qui permet l'élimination des espèces chimiques sans importance et des réactions qui y sont liées. La méthode est basée sur la théorie des graphes et, par conséquent, est communément appelée DRG, qui est un acronyme de *directed relation graph*; ainsi, r_{AB} est également appelé une *relation*. La méthode DRG permet non seulement l'identification d'espèces individuelles sans importance, mais aussi l'identification de groupes des espèces qui sont sans importance et peuvent donc être supprimées en tant que groupes ou, si elles sont importantes, sont conservées en tant que groupes.

Dans ce travail, le DRG est utilisé pour générer un mécanisme squelettique à partir d'un mécanisme détaillé complet de réactions élémentaires. Plus précisément, le mécanisme détaillé complet utilisé ici est le mécanisme dit GRI version 3.0 [126]. Cependant, le DRG présente des limites bien connues en ce sens que, sous sa forme originale, il n'élimine d'un mécanisme de réaction que les espèces qui ont un effet négligeable sur le taux de production des autres espèces. Ce faisant, le DRG n'élimine pas les espèces qui peuvent avoir un effet non négligeable sur le taux de production d'autres espèces mais qui sont néanmoins sans importance ou sans intérêt pour le problème de combustion spécifique considéré [36]. Par exemple, pour un cas spécifique, en particulier dans les applications d'ingénierie, les concentrations de certaines ou même de nombreuses espèces A peuvent ne pas présenter d'intérêt même si leurs relations r_{AB} avec de nombreuses espèces B peuvent ne pas être faibles. Afin de pouvoir réduire les mécanismes au-delà des limites connues par la méthode DRG, c'est-à-dire de pouvoir dériver des mécanismes squelettiques encore plus petits, la méthode DRG originale a été complétée par plusieurs schémas de réduction auxiliaires. Ces schémas de réduction sont présentés et discutés dans la suite de cette partie. Dans la section (2.2.3), un autre schéma de réduction, à savoir DRGASA, couplé au DRG et appliqué dans le cadre de cette thèse sera présenté.

2.2.3 Méthode "DRG-Aided Sensitivity Analysis" (DRGASA)

L'analyse de sensibilité est un outil général et puissant pour l'identification des paramètres dont les valeurs ont une influence suffisamment faible sur une quantité dite *cible*. Par exemple, pour un processus d'allumage homogène, le temps de retard d'allumage τ pourrait être sélectionné comme cible, et l'influence des valeurs des paramètres de taux des réactions individuelles sur cette cible pourrait être intéressante. Dans cet exemple, les coefficients de sensibilité relatifs [171],

$$S_{\tau}^{(i)} = \frac{k_i}{\tau} \frac{\partial \tau}{\partial k_i} \approx \frac{k_i^*}{\tau^*} \frac{\Delta \tau}{\Delta k_i}, \quad (2.70)$$

sont évaluées, où spécifiquement la variation de la constante de taux k_i est réalisée par une variation des constantes $A_{i,f}$ et $A_{i,b}$, respectivement. Dans la deuxième égalité de (2.70), Δk_i désigne une perturbation prescrite d'un délais d'environ τ^* , et $\Delta \tau$ est l'écart qui en résulte.

Dans le cadre de cette thèse, les valeurs de température $T_n = T(Z_n)$, où $0 = Z_1 < \dots < Z_N$ désignent les valeurs discrètes de la fraction de mélange qui ont été obtenues par discrétisation en code informatique. Le paramètre varié était le nombre d'espèces dans le mécanisme de réaction. Plus précisément, une première exécution avec toutes les espèces K a donné T_n^* , $n = 1, \dots, N$. Ensuite, pour chaque cycle suivant, une espèce différente a été éliminée à la fois, c'est-à-dire que chaque cycle suivant a été effectué avec les espèces K –

$\Delta K := K - 1$. Ensuite, pour chaque passage, l'écart relatif résultant

$$S_{T_n}^k \approx \frac{K}{T_n^*} \frac{\Delta T_n^k}{\Delta K} = \frac{K}{T_n^*} \frac{T_n^* - T_n^k}{1} = K \frac{T_n^* - T_n^k}{T_n^*}, \quad (2.71)$$

aurait pu être calculé. Dans (2.71), K est le nombre d'espèces dans le mécanisme de réaction, c'est-à-dire une constante. La dérivation de l'équation (2.71) aide à comprendre la formulation originale d'un coefficient de sensibilité quelque peu différent mais toujours similaire qui est habituellement cité dans l'analyse de sensibilité DRG également appelée DRGASA [36], et qui a également été évalué, plutôt que les coefficients $S_{T_n}^k$ donné en équation (2.71),

$$E_k := \max_{x \in \mathcal{D}} \frac{|x - x^*|}{x^*}, \quad (2.72)$$

où E_k est un coefficient de sensibilité, ou erreur, selon la terminologie de la DRGASA, et x un objectif de sensibilité telle que la température T ; \mathcal{D} désigne un domaine temporel ou spatial dans lequel des valeurs discrètes de x , telles que T_n , sont définies.

Élimination des réactions sans importance

Après avoir fait une présentation du coefficient de relation r_{AB} dans la section 2.2.2, il est facile de comprendre ce que c'est que *l'indice d'importance*, $I_{A,i}$, défini comme

$$I_{A,i} = \frac{|\nu_{A,i}\omega_i|}{\sum_{j=1}^I |\nu_{A,j}\omega_j|}, \quad (2.73)$$

peut être interprétée comme la contribution de la i -ième réaction au taux de production des espèces A , $A = 1, \dots, K$, $i = 1, \dots, I$ [35].

Sur la base d'un seuil ϵ spécifié par l'utilisateur pour toutes les espèces, la réaction i est dite "sans importance" et retirée du mécanisme squelettique si $I_{A,i} < \epsilon$ pour toutes les espèces A , c'est-à-dire $A = 1, \dots, K$. Si la réaction est importante, alors elle est maintenue dans le mécanisme squelettique. Dans les calculs effectués dans le cadre de ce travail, des valeurs typiques de ϵ ont été trouvées dans la gamme de 0,1 à 0,3. Plus précisément, avec un seuil de cet ordre de grandeur, il a été constaté que souvent, jusqu'à 40% des réactions d'un mécanisme détaillé de réactions élémentaires pouvaient être éliminées.

Élimination de la réaction basée sur la DRGASA

Dans le cadre de ce travail, il a été constaté que le DRG, le DRGASA et l'élimination des réactions non importantes, tels que décrits dans les sections 2.2.2 et 2.2.3, respectivement, conduisaient à un mécanisme "squelettique" qui n'était pas vraiment le plus petit mécanisme de réaction détaillé possible et ne méritait donc pas d'être nommé "mécanisme squelettique". On a donc cherché un moyen, ou une méthode, permettant de réduire davantage un mécanisme. Il a été constaté qu'un critère similaire à (Eq. 2.72) est constructif, mais qu'il est maintenant appliqué à des réactions individuelles plutôt qu'à des espèces individuelles. En d'autres termes, plutôt que de retirer du mécanisme une espèce k à la fois, ce qui, selon (Eq. 2.72) donne un coefficient de sensibilité ou une erreur E_k , maintenant une réaction i est retirée du mécanisme à la fois, donnant un coefficient de sensibilité ou une erreur

$$E_i := \max_{x \in \mathcal{D}} \frac{|x^* - x|}{x^*}, \quad (2.74)$$

où E_i est l'erreur induite pour cibler des paramètres globaux tels que le profil de température en raison de l'élimination de la i -ième réaction du *mécanisme squelettique de départ*; ici, le *mécanisme squelettique de*

départ est celui qui est dérivé après application successive de DRG, DRGASA et élimination des réactions non importantes, respectivement.

Dans les applications considérées, liées aux combustions d'"oxyfuel" (Méthane à près de 90% et O₂ pur) et de méthane-air (avec le méthane dilué), il a été constaté que l'application du critère (Eq. 2.74) permet de réduire après application du DRG, DRGASA et élimination des réactions non importantes le mécanisme de réaction de 30 à 40% des réactions élémentaires. Les mécanismes ainsi obtenus pourraient généralement être considérés comme de véritables mécanismes squelettiques de départ.

2.2.4 Mise en œuvre et organigramme des méthodes de réduction

Mise en œuvre des méthodes de réduction

Utilisant un code de réduction interne basé sur une approche améliorée de la réduction multi-étapes et incluant les équations de flammelettes simplifiées (Eqs. 2.75 et 2.76), les travaux introduits par Bomba [47], et poursuivis par Noume *et al.* [9, 11] ont permis d'élaborer des mécanismes cinétiques squelettiques de type C₂.

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \omega_k, \quad (2.75)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^K h_k \omega_k. \quad (2.76)$$

Dans les équations (2.75) et (2.76), ρ désigne la densité massique du mélange, t le temps, Z la fraction du mélange et Y_k la fraction massique de l'espèce k , $k = 1, \dots, K$, où K désigne le nombre d'espèces dans le système. Les quantités w_k , h_k , et Le_k sont le taux de production massique, l'enthalpie et le nombre de Lewis, respectivement, de l'espèce k ; T est la température et c_p la capacité thermique spécifique basée sur la masse du mélange à pression constante. La quantité χ désigne le taux de dissipation scalaire. Dans la présente étude, χ est approximé comme une fonction de la fraction du mélange [172] :

$$\chi \approx \frac{a_\infty}{\pi} \exp\{-2[erfc^{-1}(2Z)]^2\}. \quad (2.77)$$

La technique de réduction en plusieurs étapes utilisées dans ce travail consiste en quatre méthodes telles que élaborées dans les travaux de thèse de Bomba, à savoir, le graphe de relation dirigée (DRG), l'analyse de sensibilité assistée par le DRG (DRGASA), l'élimination des réactions à faible importance et l'élimination de réaction basée sur DRGASA. Ils sont mise en œuvre et implémentées dans un environnement Chemkin, dans une flamme laminaire contre-courant modélisée par les flammelettes.

Organigramme des procédures de réduction

Les quatre méthodes de réduction évoquées ci-dessus sont généralement appliquées successivement. Les méthodes et l'ordre dans lequel elles sont exécutées sont résumés sur l'organigramme présenté à la figure. 2.4. Nous examinons maintenant cette figure en prenant le mécanisme du GRI 3.0 [126] comme exemple de mécanisme véritablement détaillé à partir duquel la procédure de réduction globale démarre.

À ce stade, il est important de noter qu'avant le démarrage de la procédure de réduction globale, le mécanisme a été testé avec succès pour bien décrire le problème de combustion en question dans toute sa gamme de paramètres d'intérêt. Une telle évaluation comparative peut être effectuée, par exemple, par rapport à des résultats expérimentaux ou à des résultats de calcul obtenus sur la base d'un mécanisme encore plus complet et détaillé de réactions élémentaires.

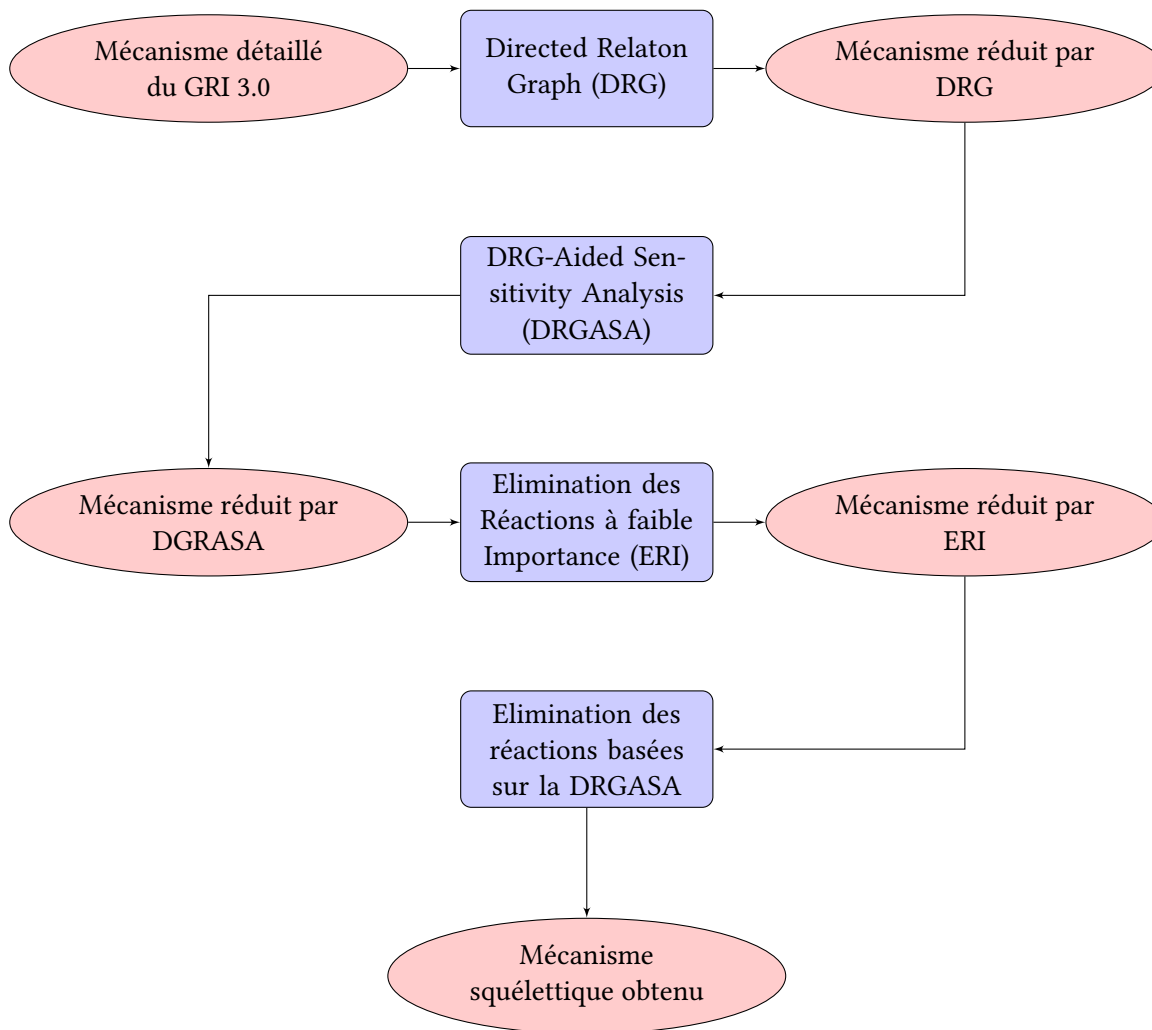


FIGURE 2.4 – Organigramme de la procédure de réduction du squelette.

Dans le coin supérieur gauche de la figure 2.4, le mécanisme GRI3.0 sert d'entrée à la procédure globale de réduction du mécanisme. Le mécanisme GRI3.0 comprend 325 réactions élémentaires parmi 53 espèces chimiques.

- L'utilisation de la méthode de réduction DRG permet d'obtenir un premier mécanisme dérivé du GRI 3.0. Le mécanisme qui en résulte ne peut par définition, être appelé un mécanisme squelettique car il ne s'agit pas encore du plus petit mécanisme possible de réactions élémentaires dont, en fin de compte, un mécanisme de réaction global composé d'étapes de réaction globale sera dérivé.
- Le mécanisme détaillé réduit obtenu par le DRG est encore réduit en employant le DRGASA, ce qui donne un mécanisme de réactions élémentaires comprenant un nombre de réactions élémentaires et des espèces inférieur au mécanisme précédant.
- Par la suite, l'élimination des réactions sans importance est employée, conduisant à un mécanisme de réactions élémentaires comprenant des réactions élémentaires et des espèces en nombre encore simplifier.
- Enfin, l'élimination des réactions basée sur DRGASA est employée, conduisant au mécanisme détaillé final comprenant des réactions élémentaires parmi des espèces ; le mécanisme ainsi obtenu est dit squelettique. Ce mécanisme squelettique sert de point de départ pour les procédures d'obtention du mécanisme appelé "méca-

nisme réduit".

Tous les processus de réduction développés dans cette thèse ont été fait en considérant une diffusion différentielle. Cela s'est fait en supposant que les équations (2.75) et (2.76) peuvent être considérées comme des équations d'ordre supérieur résultantes, (i) d'une expansion des propriétés de transport variables exprimées en termes de nombres de Lewis variables convenablement définis autour de valeurs de référence constantes et, (ii) d'une expansion similaire de la masse molaire du mélange gazeux qui, traditionnellement, est également appelée poids moléculaire du mélange. Les nombres de Lewis pour l'équation de la fraction de mélange, sont définis comme suit

$$Le_Z = \frac{\lambda}{\rho c_p D_Z}, \quad (2.78)$$

ou pour l'équation de conservation des espèces k donné par

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}, \quad (2.79)$$

$k = 1, \dots, K$, où D_Z et D_k , respectivement, sont des coefficients de diffusion moyens définis. La masse molaire du mélange, W , est donnée, en termes de fractions molaires ou massiques des espèces, Y_k ou X_k , respectivement, par le mélange

$$W = \sum_{k=1}^K X_k W_k = \left[\frac{Y_k}{W_k} \right]^{-1}, \quad (2.80)$$

où W_k désigne la masse molaire de l'espèce k, $k = 1, \dots, K$. Si les termes de propriété variables du second ordre sont pris en compte plutôt que négligés, on obtient les équations suivantes régissant la conservation de la masse des espèces et la conservation de l'énergie globale conservation de l'énergie globale qui peuvent être consulté dans l'article de Pitsch et Peters [172].

2.2.5 Présentation des Mécanismes chimiques

Un mécanisme de cinétique chimique de combustion peut être représenté à différents niveaux de complexité, allant d'un mécanisme à une seule réaction globale à un mécanisme détaillé comprenant parfois plus d'une centaine d'espèces.

En ordre de complexité croissante, nous avons [56] : les mécanismes réduits (moins de 10 réactions et environ 4 ou 5 espèces), mécanismes squelettiques (moins de 50 réactions et une vingtaine d'espèces) et mécanismes détaillés (plus de 200 réactions). Les paragraphes qui suivent nous présentent les mécanismes utilisés pour les différentes simulations effectuées dans ce travail.

Mécanisme détaillé du GRI 3.0

Le GRI-Mech 3.0 est un mécanisme optimisé conçu pour modéliser la combustion du gaz naturel, y compris la formation de NO et la chimie du rebrûlage. Il s'agit du successeur de la version 2.11, et d'une nouvelle étape dans l'évolution continue de la mise à jour du mécanisme [126]. Des améliorations ont été apportées dans les catégories suivantes : mise à jour de la cinétique avec les résultats récents de la littérature, inclusion d'expériences cibles nouvelles et améliorées dans l'optimisation, élargissement du mécanisme et de la sélection des cibles, et examen de la sensibilité à la thermodynamique. Ce mécanisme peut être utilisé comme modèle chimique dans différentes conditions de la combustion ; dans la combustion de pré-mélanges, ainsi que dans la combustion non-prémélangée. C'est un mécanisme de 51 espèces et 325 réactions allant des espèces de type C_1 aux espèces de types C_3 .

Mécanismes squelettiques de Yang et Pope

Dans le but d'étudier l'influence des mécanismes cinétiques lors des simulations de la combustion turbulente non pré-mélangée, quatre mécanismes ont été employés parmi lesquels le mécanisme de Yang et Pope [83]. C'est un mécanisme squelettique de type C₁ impliquant 16 espèces et 41 réactions. Il a été employé dans quelques travaux précédent de combustion turbulente [8, 173]. Il est issu du mécanisme de Correa [174], qui constitue une cinétique de combustion du méthane, représentée ici par 27 espèces et 77 schémas réactionnels. Les 16 espèces données par les schémas réactionnels simplifiés de Yang et Pope sont les suivants : CH₄, O₂, CO₂, H₂O, CO, H, H₂, O, OH, CH₂O, HCO, CH₃, HO₂, H₂O₂, CH₃O, N₂. Ce mécanisme est consigné dans un tableau de l'article de James *et al.* [173].

Mécanisme semi-global de Jones et Lindstedt et Mécanisme global

En étudiant les flammes pré-mélangées et non pré-mélangées des hydrocarbures alcanes, Jones et Lindstedt [175] ont proposé un autre ensemble de réactions cinétiques simplifiées couramment utilisées. Ce modèle cinétique semi-global a été optimisé par Cuoci *et al.* [176]. Ce qui permet d'obtenir un mécanisme de 7 espèces (CH₄, O₂, CO₂, H₂O, CO, H₂, N₂) pour 8 réactions. Il constitue ainsi le troisième mécanisme que nous avons utilisé (voir tableau 2.2).

Tableau 2.2 – Modèle chimique de Jones and Lindstedt [175], optimisé par Cuoci *et al.* [176] ; unités de A (mol, cm³, sec) ; E (cal/mole)

Réactions Considérées	A mole, cm ³ , sec	b	E cal/mole
1- CH ₄ + $\frac{1}{2}$ O ₂ → CO + 2H ₂	4.4E+11	0	30000
2- CH ₄ + H ₂ O → CO + 3H ₂	3E+08	0	30000
3- CO + H ₂ O ↔ CO ₂ + H ₂	2.75E+09	0	20000.0
4- H ₂ + 0.5O ₂ ↔ H ₂ O	6.80E+15	-1	40000
5- O ₂ ↔ 2O	1.50E+9	0.0	113000
6- H ₂ O ↔ H + OH	2.30E+22	-3.0	120000

Un autre mécanisme utilisé pour l'étude de l'influence des mécanismes cinétiques dans la simulation de la flamme DLR-A est donné par le tableau 2.3. Il est constitué de deux équations globales que nous avons combiné sur la base que le carburant est une composition de CH₄/H₂/N₂. Dans ce cas, deux mécanismes réactionnels à une étape pour le CH₄ et une autre étape pour le H₂, obtenues dans les solveurs d'écoulement réactif de OpenFOAM. Ils sont utilisés simultanément pour la prise en compte du mélange CH₄-H₂, en supposant que,

Tableau 2.3 – Modèle chimique à deux étapes ; unités de A (mol, cm³, sec) ; E (cal/mole)

Réaction globale	A	b	E	Ref.
1- CH ₄ + O ₂ = CO ₂ + 2H ₂ O	5.2E+19	0	29620	[177]
2- H ₂ + 0.5O ₂ = H ₂ O	9.87E+11	0	15600	[177]

lors de la dilution, la combustion du mélange prenne en compte l'oxydation dans l'air de chaque élément de la composition combustible (CH₄ et H₂) selon un modèle cinétique global. Ce qui permet d'avoir un mécanisme en deux étapes et six espèces. Dans ces tableaux, A, b et E sont, la constante pré-exponentiel, le facteur de fréquence et l'énergie d'activation, respectivement.

2.3 Outils et Simulations Numériques

Les simulations effectuées dans ce travail ont suivi trois grandes étapes présentées à la figure (2.5) à savoir, le **pré-traitement** consacré à la conception des maillages (par le logiciel **gmsh**), le **traitement** où sont définis les conditions initiales et aux limites pour les procédures de calcul (**OpenFOAM**) et enfin, le **post-traitement** pour les visualisations et l'analyse des résultats (**paraFoam** et **gnuplot**). Cette section donne un aperçu sur le code OpenFOAM utilisé pour les simulations CFD (Computational Fluid Dynamics) effectuées dans cette thèse. Il nous permet aussi de présenter le logiciel utilisé pour le maillage (Gmsh).

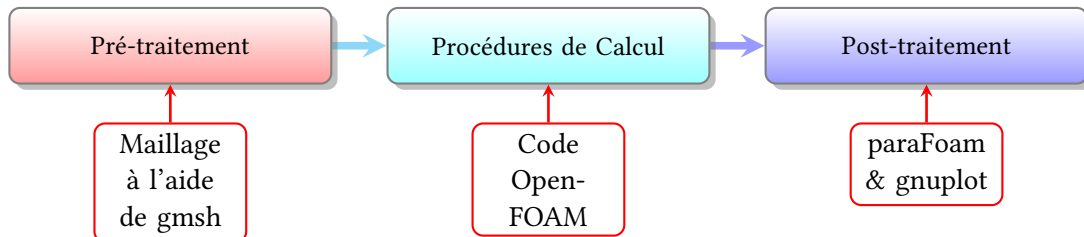


FIGURE 2.5 – Séquences de procédure de simulation dans OpenFOAM

2.3.1 Présentation de Gmsh

Gmsh est un logiciel libre créé par Christophe Geuzaine et Jean-François Remacle [178], permettant de générer des maillages 2D et 3D de type éléments finis. Une fois les maillages construits ils peuvent être utilisés ensuite par un logiciel de traitement (Fluent, Saturne, OpenFoam...). Il est sous licence GNU-GPL (GNU's Not UNIX – General Public Licence) et peut être téléchargé librement à l'adresse <http://www.geuz.org/gmsh/>.

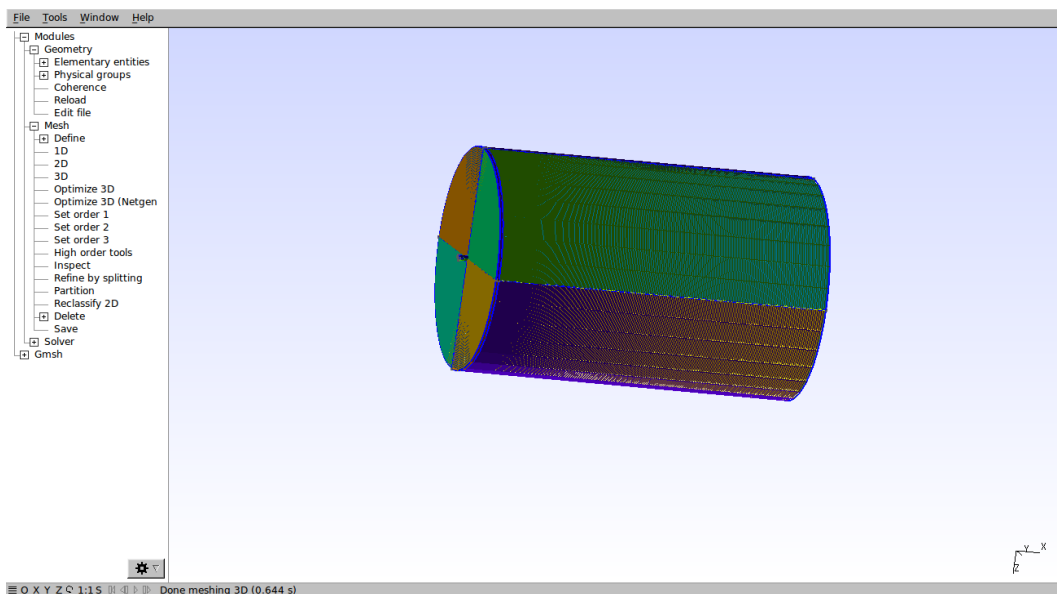


FIGURE 2.6 – Interface graphique du logiciel de maillage Gmsh.

Gmsh peut être utilisé sous les plates-formes LINUX, WINDOWS et MAC, et possède une interface simple, proposant initialement 4 modules sous «Geometry», son onglet principal :

- **Elementary entities** : Création/modification/Suppression d'éléments élémentaires comme les points, les segments, les surfaces...
- **Physical groups** : Permet de définir physiquement un élément, par exemple en définissant une surface nous pouvons définir «wall» ou «inlet» ou «outlet» ou encore « symmetry » sous le logiciel OpenFOAM.

- **Edit** : Permet de lire le «code source» du maillage, pour modifier les dimensions sans tout recréer par exemple. C'est ce fichier qui est sauvegardé en .geo, et qui permet de réunir toutes les informations données au maillage.

- **Reload** : Après avoir modifié le code source, cliquez sur Reload pour charger la nouvelle géométrie.

2.3.2 Présentation du Code de OpenFOAM

OpenFOAM est une bibliothèque Open Source orientée objet pour les simulations numériques en mécanique des continus, écrite dans le langage de programmation C++. OpenFOAM est de plus en plus utilisé dans la recherche universitaire et dans le cadre industriel. Libre et ouvert il est à la fois utilisé comme multi-solveurs CFD et comme code d'analyse. Les principaux éléments de sa conception sont les suivants :

- Syntaxe expressive et polyvalente, permettant une mise en œuvre aisée d'un modèle physique complexe ;
- Des capacités étendues, y compris une richesse de modélisation physique, une discrétisation précise et robuste et un traitement de géométrie complexe, au niveau présent dans les CFD commerciales ;
- Architecture ouverte et développement à source ouverte, où le code source complet est disponible à tous les utilisateurs pour une personnalisation et une extension sans frais.

Un solveur de OpenFOAM appelée reactingFoam est utilisée pour les calculs numériques dans cette thèse.

ReactingFoam est un solveur transitoire pour simuler des systèmes compressibles, laminaires/turbulents. Ce solveur utilise des données cinétiques de réactions et de thermodynamiques pour obtenir le taux de consommation et de production des espèces. De plus, ce solveur prend en charge certains modèles thermo-physiques pour obtenir les propriétés requises de la phase de mélange fluide. Des méthodes numériques spéciales sont disponibles pour obtenir la vitesse des réactions rapides avec une grande précision et pour éviter les instabilités causées par les systèmes d'ode rigides. Différents modèles thermo-physiques et réactionnels implémentés dans ce solveur permettent de simuler la plupart des systèmes réactifs dans les applications d'ingénierie. Il est également possible d'étendre les modèles existants en utilisant la programmation C++. Divers modèles de combustion accompagnent également le solveur pour simuler des systèmes de combustion turbulente. Pour les systèmes de combustion complexes, certains utilitaires sont fournis pour importer facilement les données cinétiques provenant d'autres sources.

La visualisation des résultats se fait dans ParaView (paraFoam), un outil d'analyse et de visualisation de données. La structure d'OpenFOAM dans les cas de combustion se compose de quatre répertoires : répertoires de temps, de constante, de chimie et de système. La section suivante décrit en détail la structure d'OpenFOAM et donne la configuration de base pour un cas de combustion.

▷ Les répertoires temporels

Les répertoires temporels sont utilisés pour stocker les résultats d'une simulation dans un certain temps (cas transitoire) ou une certaine itération (cas stable). Les conditions limites sont également définies pour les "patches" limites. Les conditions aux limites en fonction des variables impliquées et du type d'écoulement sont définis dans les fichiers du dossier d'initialisation "0". Dans le cas le plus rudimentaire, elles comprennent le champ de vitesse U et le champ de pression p . Si l'écoulement est turbulent, les champs supplémentaires sont nécessaires. Il s'agit de l'énergie cinétique de turbulence k , le taux de dissipation de l'énergie de turbulence ε et la viscosité cinématique turbulente résultante ν_t (dans le cas d'un écoulement incompressible) ou la viscosité dynamique turbulente μ_t (dans le cas d'un écoulement compressible). Pour résoudre l'équation de l'énergie, le champ de température T et le coefficient de diffusivité thermique turbulente α_t sont nécessaires. Dans les flux de combustion, les champs d'espèces individuels sont également importants (par exemple CH_4 , CO_2 ,


```

5
(
CH4
O2
N2
CO2
H2O
);
reactions
1
(
    irreversibleArrheniusReaction
    CH4 ^ 0.7 + 2O2 ^ 0.8 = CO2 + 2H2O
    (9.48683e+11 0 23650)
);
// ***** //

```

La première entrée dans le bloc des espèces est le nombre d'espèces dans la réaction, suivie de la liste des espèces concernées. Il est important de noter que les espèces doivent être écrites dans le même format que celui des répertoires time et du fichier thermodynamique de chimie. Selon la même logique, le bloc des réactions commence par un nombre entier qui indique le nombre de réactions. Le mot-clé `irreversibleArrheniusReaction` indique que la réaction est irréversible et que les taux de réaction sont calculés en utilisant la loi d'Arrhenius (Equation (2.81)). La loi d'Arrhenius est souvent modifiée pour modéliser la réaction globale de manière plus réaliste en ajoutant une dépendance à la concentration de combustible et d'oxydant sous la forme de coefficients de réaction a et b :

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) [Fuel]^a [O_2]^b. \quad (2.81)$$

Les coefficients de réaction sont écrits derrière l'espèce, par exemple 0,7 pour le CH₄. Les nombres en dessous de la réaction sont les constantes du taux de réaction (en commençant par la gauche) :

- la constante pré-exponentielle $A_{fj} = 9,48683e11 \text{ [(m}^3/\text{kmol)}^{r-1} \text{ s}^{-1}]$,
- l'exposant de température $\beta_j = 0[-]$,
- la température d'activation $T_j = E_j/R = 47e3[\text{cal/mol}]$.

Comme on l'a vu plus haut, les unités des taux de réaction diffèrent selon le format. Il convient d'apporter un soin particulier à la rédaction des taux de réaction, car il n'existe pas de jeu d'unités standard. Comme de nombreux mécanismes de combustion sont disponibles dans le format CHEMKIN, la conversion au format OpenFOAM est possible en utilisant l'utilitaire `chemkinToFoam`.

Fichier de thermodynamique

Le fichier thermodynamique est une liste des coefficients polynomiaux de la NASA utilisés pour calculer les propriétés thermodynamiques des espèces. Le fichier est construit à partir de blocs d'espèces où les propriétés de chaque espèce sont définies. Le bloc d'espèces (dans ce cas pour O₂) a la syntaxe suivante :

```

// * * * * * //
// thermo.OF
O2 O2 1 31.9988
200 5000 1000

```

```

3.69758 0.00061352 -1.25884e-07 1.77528e-11 -1.13644e-15 -1233.93 3.18917
3.21294 0.00112749 -5.75615e-07 1.31388e-09 -8.76855e-13 -1005.25 6.03474
1.67212e-06 170.672
// ***** //

```

La première ligne contient le nom de l'espèce et la masse molaire de l'espèce (dans ce cas 31.9988). La deuxième ligne indique les plages de température, la plage de basse température (200-1000 K) et la plage de haute température (1000-5000 K). La troisième ligne définit les coefficients polynomiaux qui sont utilisés pour calculer la capacité thermique c_p , l'enthalpie h et l'enthalpie de formation $\Delta h_{f,k}^0$ pour la plage de températures élevées. Les sept chiffres suivants font de même pour la plage de basses températures. Les deux derniers nombres sont les constantes A_s et T_s utilisées dans la formule de Sunderland (Equation 2.5). Le fichier thermodynamique du GRI-Mech 3.0 [126] est utilisé pour tous les cas de test de cette thèse. Pour plus d'informations sur la JANAF et la dérivation des équations, le lecteur est renvoyé à [180].

chemkinToFoam

L'utilitaire chemkinToFoam peut être utilisé pour convertir les fichiers de données thermodynamiques et réactionnelles CHEMKIN II en format du type OpenFOAM (m^3 , kmole, Joules, K) pour s'assurer de la cohérence des différents mécanismes de réaction. Si on considère le mécanisme global suivant : $Fuel + xO_2 \rightarrow yCO_2 + zH_2O$, avec l'expression du taux : $k = AT^\beta e^{-Ea/RT} [Fuel]^a [O_2]^b$.

$$A(\text{cm}^3/\text{mole})^{r-1} s^{-1} \xrightarrow[\text{chemkinToFoam}]{\times 10^{-3(r-1)}} A(\text{m}^3/\text{kmole})^{r-1} s^{-1},$$

$$Ea(\text{cal}/\text{mole}) \xrightarrow[\text{chemkinToFoam}]{\times 4.184/R} Ta(\text{K}),$$

où $r = a + b$, $R = 8,314 J/mol.K$ est la constante universelle des gaz et 4,184 est le facteur de conversion des calories en joules.

▷ Répertoire du système

Le répertoire du système contient les paramètres spécifiés par l'utilisateur qui sont utilisés dans la procédure de solution, ainsi que les fichiers nécessaires pour décomposer le domaine afin qu'il puisse être exécuté en parallèle. Il se compose des quatre fichiers suivants :

- decomposePar est utilisé pour définir comment le domaine sera décomposé en cas de fonctionnement parallèle. Cette opération est généralement effectuée automatiquement, mais dans les cas de combustion, il est conseillé de décomposer le domaine manuellement si possible. Comme la résolution des mécanismes est plus coûteuse en termes de calcul que la résolution des équations de transport, il est recommandé de décomposer le domaine de manière à ce que la flamme soit également répartie sur chaque processeur.
- fvSolution est l'endroit où les solveurs d'équations linéaires, les tolérances et autres contrôles d'algorithmes sont définis. Le nombre de boucles externes et internes dans l'algorithme PIMPLE est prescrit ici.
- controlDict est utilisé pour contrôler les paramètres d'exécution de la simulation tels que la durée de la simulation, le pas de temps et les contrôles et formats d'écriture. Il est possible de calculer automatiquement la taille du pas de temps pour respecter le nombre maximal de Courant Co :

$$Co = \Delta t \sum_{i=1}^3 \frac{u_i}{\Delta x_i}. \tag{2.82}$$

Le pas de temps Δt est déterminé en fixant la valeur maximale de Courant, entre 0,3 et 0,4 dans le cas de cette thèse.

La procédure de solution

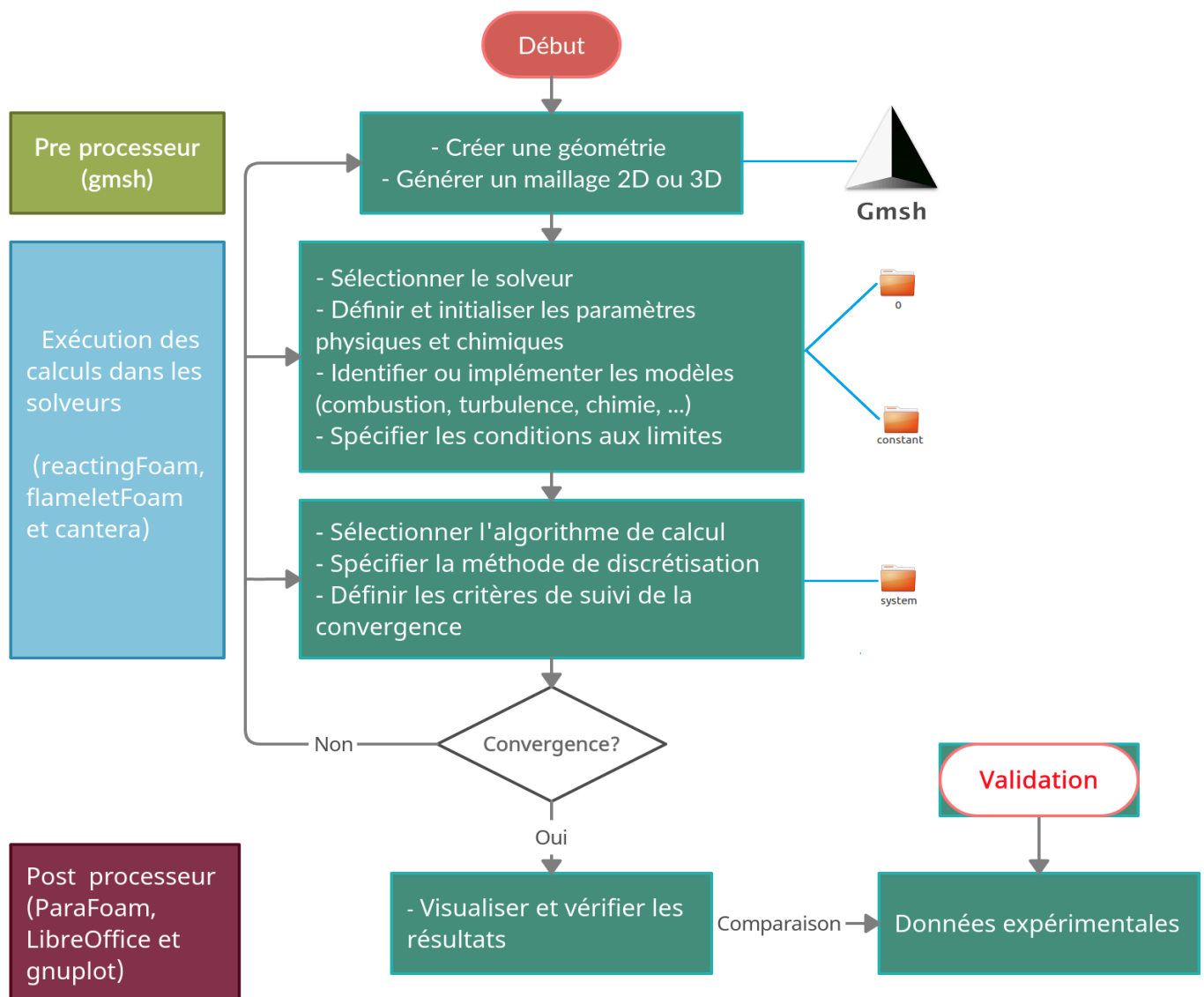


FIGURE 2.7 – Organigramme "CFD" : pré-traitement, exécution des simulations et post-traitement.

La simulation de la combustion pose un problème d'un point de vue numérique, en raison des grands gradients de température, et donc de pression. Par conséquent, les cas sont généralement initialisés pour calculer un état de non combustion quasi-stable qui est fixé comme valeur initiale pour le cas de combustion. On utilise le solveur reactingFoam, un solveur compressible capable de simuler des réactions chimiques, basé sur l'algorithme PIMPLE. PIMPLE combine les algorithmes PISO et SIMPLE, de sorte que le couplage pression-vitesse est résolu pour chaque pas de temps. La principale différence entre les algorithmes PISO et PIMPLE est l'inclusion de boucles de correction externes utilisées pour faire converger les parties explicites de l'équation. En réglant les boucles externes sur 1 (en utilisant le mot-clé nOuterCorrectors), l'algorithme PIMPLE fonctionne en mode PISO. L'utilisation de boucles externes permet à l'algorithme PIMPLE de fonctionner en mode PISO.

La figure 2.7, résume et présente succinctement les étapes procédurales permettant les simulations de la combustion dans cette thèse, allant du maillage de la géométrie, aux traitements et visualisation des résultats, en passant par l'exécution des calculs à l'aide des solveurs.

2.3.3 Présentation du code cantera

CANTERA est un logiciel open source basé sur une interface python, écrit en C et orienté objet pour des problèmes de cinétique chimique, de thermodynamique et/ou de processus de transport [16]. Son objectif est de fournir à l'utilisateur différentes solutions de référence avec une chimie détaillée et un transport complexe dans des cas canoniques afin qu'il puisse les utiliser dans d'autres calculs.

Cantera est une collection d'outils logiciels orientés objet pour les problèmes impliquant la cinétique chimique, la thermodynamique et les processus de transport. Entre autres choses, il peut être utilisé pour effectuer des simulations cinétiques avec de grands mécanismes de réaction, pour calculer l'équilibre chimique, pour évaluer les propriétés thermodynamiques et de transport des mélanges, pour évaluer les taux de production chimique d'espèces, pour effectuer une analyse du chemin de réaction, pour créer des simulateurs de processus utilisant des réseaux des réacteurs agités, et de modéliser les fluides non idéaux. Cantera est toujours en développement et de nouvelles fonctionnalités continuent d'être ajoutées.

2.3.4 Création de la Librairie CFD des Flammelettes dans cantera

Avant de faire la simulation dans le CFD, nous avons besoin d'une intégration de la fonction bêta-PDF présumé dans le modèle des flammelettes, pour tenir compte de l'interaction entre les fluctuations de la turbulence et la chimie. Les résultats de cette procédure sont stockés dans des tables auxquelles on accède lors de la simulation. Les résultats d'intérêt, tels que la fraction massique ou l'enthalpie des espèces, sont recherchés et connectés à l'écoulement à l'aide de trois paramètres : le mélange \tilde{Z} , sa variance $\widetilde{Z''^2}$ et le taux de dissipation scalaire χ . L'équation permettant d'obtenir le taux de dissipation scalaire χ est donnée par :

$$\chi = \frac{2a}{\pi} \exp \left[-2 \left(\text{erf}^{-1}(2Z_{st}) \right)^2 \right]. \quad (2.83)$$

Principe de calcul d'une bibliothèque des flammelettes

La génération de la bibliothèque de flammelets se fait en quatre étapes. La première étape applique la transformation des coordonnées aux équations de transport scalaire instantanées dans l'espace physique à l'espace des fractions de mélange. Ensuite, la construction d'une table correspondante aux quantités scalaires ϕ est faite en fonction de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire $\phi(Z, \chi)$. L'étape avant la dernière utilise l'approche statistique PDF pour générer la bibliothèque de flammelets en termes de quantités moyennes de scalaires $\tilde{\phi}(\tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \tilde{\chi})$ en fonction de la fraction de mélange Favre-moyenne, de la variance et du scalaire taux de dissipation. Enfin, la bibliothèque moyenne de flammelettes $\tilde{\phi}(\tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}, \tilde{\chi})$ est directement liée aux calculs d'écoulement turbulent pour chaque point de grille en utilisant les équations (2.41 2.42 2.43) pour l'approche RANS et les équations ((2.41, 2.44 et 2.45) pour l'approche LES. Cependant, les principales hypothèses utilisées dans la construction de la bibliothèque de flammelets étaient :

- Négliger les directions tangentielles de la transformation des fractions du mélange ;
- Négliger les fluctuations du taux de dissipation scalaire $\tilde{\chi}''^2$ de la fonction delta pdf ;
- Utilisez la dissipation scalaire stœchiométrique $\tilde{\chi}_{st}$ comme paramètre de base puisque la plupart de la chimie se produit autour de la condition stœchiométrique.

Les méthodes SLFM peuvent être dérivées des équations décrivant la flamme à contre-courant comme le montre la figure 2.2, en adoptant une transformation de coordonnées de l'espace physique à l'espace de fraction de mélange. La fraction de mélange est un scalaire conservé, ce qui a considérablement simplifié la solution des espèces et de la température, en particulier pour les flammes non pré-mélangées. Il est défini comme le rapport entre la masse de matière provenant du flux de combustible et la masse du mélange.

Procédure employée dans Cantera

Pour générer la table des flammelettes utilisable dans le code CFD OpenFOAM, le code open-source Cantera a été utilisé. À partir d'un outil intégrant le modèle "flamlet" précompilé, nous avons calculer les tables pour différents taux de dissipation stœchiométrique χ_{st} . La connaissance des valeurs de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire, respectivement Z et χ ainsi que de la variance de la fraction de mélange Z'' en chaque cellule de calcul permet de déduire la température, la masse volumique et la fraction massique des espèces chimiques. Une fois ces valeurs connues, elles sont stockées dans les bibliothèques. Ces tables sont générées en utilisant les paramètres de la flamme à simuler, dans la configuration d'une flamme de diffusion laminaire à contre-courant. Pour chaque rapport des espèces contenues dans le combustible, une bibliothèque de flammelettes est générée pour être ensuite exportée vers la CFD, ce qui permet de fournir les données statistiques nécessaires. De manière pratique, le solveur est conçu pour être utilisé de la façon suivante :

- Exécuter le code à l'aide de la commande : **./flamelet**
- Le solveur demandera si une première solution déjà existante doit être prise en compte. Si une solution initiale existe, il est recommandé de l'utiliser. Cependant, si aucune solution initiale n'est choisie, le flux sera initialisé avec une solution d'équilibre. Dans ce cas, le rapport d'équivalence et le type de combustible et d'oxydant doivent être fournis.
- Après convergence, le résultat sera stocké dans un dossier (canteraTables dans notre cas). Le nom du fichier comprend le taux de dissipation scalaire de la solution. Une solution initiale pour la prochaine simulation sera stockée sous le nom de solution.xml. Notez ici que la solution initiale précédente est écrasée pour faire place à la nouvelle.
- Pour capturer les effets de la contrainte, il est nécessaire de fournir des flammelets pour les taux de dissipation scalaire allant de 0 à l'extinction. Pour créer d'autres tableaux à des taux de dissipation scalaire plus élevés, il faut suivre les étapes suivantes :
 - Ouvrir le fichier input.txt et augmentez le débit massique ;
 - Réduire la longueur du domaine pour que la flamme s'y adapte. Cela peut être un processus itératif, (il s'agit de vérifier les résultats et ajuster la longueur du domaine) ;
 - Exécuter la simulation et utilisez la solution initiale de l'exécution précédente ;
 - Répéter ce processus jusqu'à ce que la limite d'extinction soit atteinte ;
 - Les pas entre les taux de dissipation scalaire au cours des différents calculs successifs devraient diminuer à l'approche de l'extinction.

2.4 Présentations des configurations expérimentales

2.4.1 Description de la flamme DLR-A

En général, l'ajout du dihydrogène dans le méthane a pour rôle au cours des expériences de stabiliser la flamme et de l'azote est ajouté pour diminuer le rayonnement thermique et améliorer la qualité des techniques de mesure [5]. Les mesures expérimentales de la température moyenne et des fractions massiques moyennes des espèces de la "DLR-A flame", dont la description est faite dans cette section, sont téléchargeables sur le site du "tnfworkshop" [181].

Le jet de carburant de la "DLR-A" représentée à la figure 2.8 émet un combustible constitué d'un mélange de 22.1% de CH_4 , 33.2% de H_2 et 44.7% de N_2 en fraction molaire. Il émane d'un tuyau en acier inoxydable de 8 mm de diamètre intérieur avec une vitesse de jet de 42.2 m/s, pour un nombre de Reynolds $Re = 15200$ et entouré d'un co-courant d'air de vitesse de 0.3 m/s. Les températures du combustible et de l'air sont toutes deux de 292 K [181]. La pression utilisée est celle de la pression ambiante de 990 mbar [2].

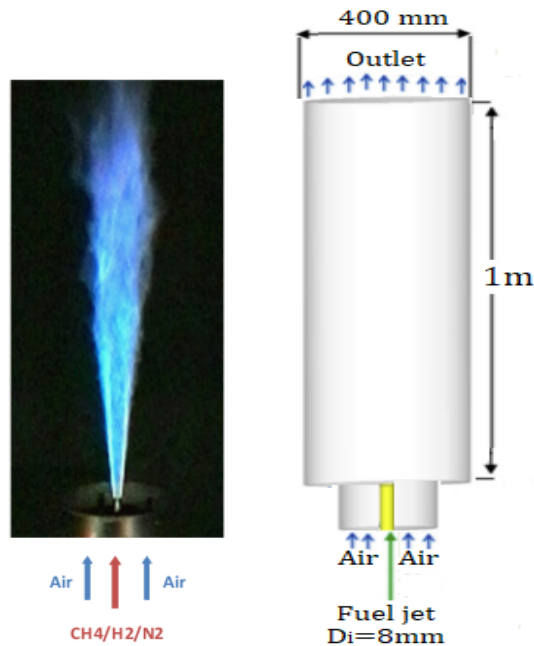


FIGURE 2.8 – Configuration de la géométrie et conditions aux limites.

Conception du domaine de calcul

Pour la conception numérique de la configuration géométrique de la DLR-A, une étude d'indépendance du maillage a été menée avec cinq tailles de maillage différentes (1410, 2272, 5064, 8200 et 16 640 cellules).

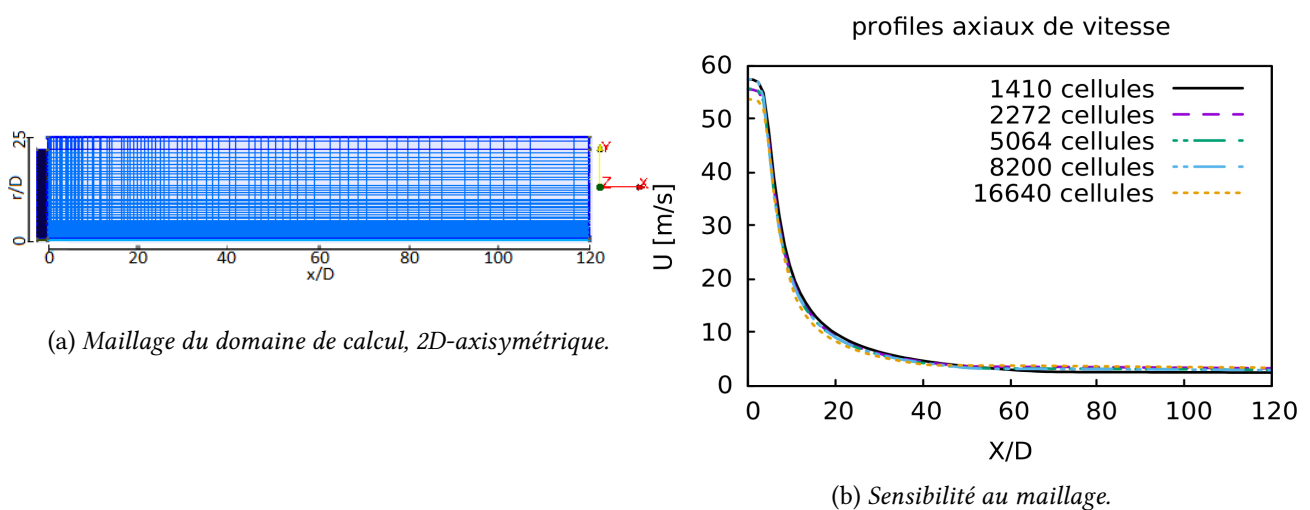


FIGURE 2.9 – Maillage axisymétrique 2D et Sensibilité au maillage pour la flamme DLR-A.

La figure 2.9b révèle que les profils de vitesse prédits dans la direction axiale obtenus avec ces maillages à froid (sans combustion) sont quasiment identiques. Ainsi, pour les calculs ultérieurs, un maillage contenant 8200 cellules a été utilisé.

Le domaine de calcul généré par le code gmsh, est un 2D-axisymétrique d'une longueur de 1 m, d'un rayon de 0.2 m et d'un angle cylindrique de 5 degrés dans la direction azimutale, pour un maillage de type "wedge". La fonctionnalité "wedge" est une condition aux limites utilisée pour les problèmes 2D-axisymétrique, inclus dans la bibliothèque de OpenFOAM, pour gagner en temps de calcul. Dans ce travail, le nombre de mailles du domaine de calcul est établi à l'aide de 72 nœuds dans la direction radiale et 110 nœuds dans la direction axiale. Les mailles sont concentrées vers l'entrée du carburant dans les directions axiale et radiale pour calculer avec

précision les phénomènes de fluctuation et de chimie, qui y sont plus accentués.

2.4.2 Description de la flamme OXYFLAM-2 A de l'IFRF

Les mesures OXYFLAM-2 de la configuration A du brûleur IFRF (Fig.2.10), d'une puissance thermique de 0,78 MW, ont été choisies pour une validation du modèle de mécanisme squelettique issu des travaux de thèse de Bomba [47].

Le diamètre d'entrée du combustible D_g est de 16 mm, tandis que l'espace annulaire pour l'oxygène a une largeur de 4 mm ($D_1 = 28$ mm, $D_2 = 36$ mm), le jet du combustible a un nombre de Reynolds de 128 600. La chambre de combustion (Voir Fig.2.10) a une longueur de 3440 mm avec une section carrée de 1050 mm \times 1050 mm. Il est revêtu d'un matériau réfractaire pour l'isolation thermique. La sortie (section carrée de 500 \times 500 mm) est placée au centre de la paroi d'extrémité de la chambre de combustion. Les vitesses d'entrée des flux de gaz naturel et d'oxygène sont respectivement de 105,4 ms^{-1} et 109,7 ms^{-1} , à la pression atmosphérique et de 273,15K. Un pyromètre d'aspiration à haute température (HTS) refroidi à l'eau a été utilisé pour les mesures de température [13].

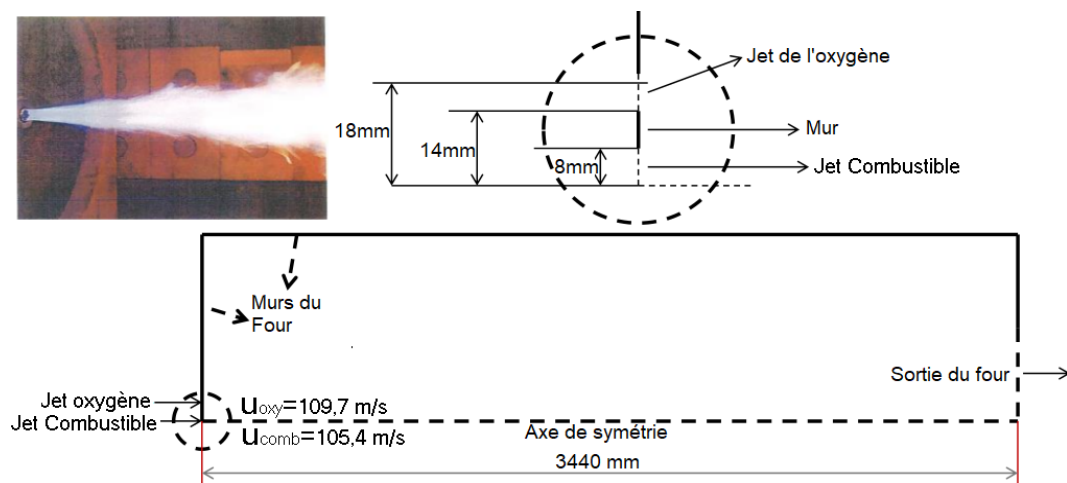


FIGURE 2.10 – Description de la configuration 2D de l'OXYFLAM-2 A.

Un maillage pseudo 2D axisymétrique du même type que celui de la flamme DLR-A a été conçu pour la simulation de la flamme "OXYFLAM-2 A". Le nombre de mailles du domaine de calcul est de 90 \times 200 dont 18000. Les tubes d'entrées de combustible et de l'air ont un nombre de mailles respectifs de 400 et 350, pour un nombre total de 19000 mailles pour toute la configuration géométrique.

2.4.3 Présentation et description de la flamme Sandia D

La "Flamme D" est une flamme qui a la particularité d'être constituée d'un jet de combustible (CH_4/Air) à réaction turbulente, entouré d'une flamme pré-mélangée pilote, et d'un co-courant d'air étudiée expérimentalement à l'Université de Sydney, aux Laboratoires nationaux de Sandia et à l'Université de Darmstadt [15]. Le flux du combustible fournit un mélange dilué de 25 % de méthane et 75 % d'air (en volume molaire) avec une vitesse d'entrée $U_{\text{jet}} = 49,6$ m/s, un nombre de Reynolds $Re = 22\,400$ et un diamètre de jet de $D = 7,2$ mm. La veilleuse annulaire brûle un mélange pauvre (rapport d'équivalence $\phi = 0,77$) de C_2H_2 , H_2 , air, CO_2 et N_2 et stabilise la flamme avec une vitesse apparente de $U_{\text{pilote}} = 11,4$ m/s, le co-écoulement laminaire d'air a une vitesse apparente de $U_{\text{coflow}} = 0,9$ m/s. De plus amples détails sur l'expérience sont fournis par Barlow et Frank [15], Schneider *et al.* [16].

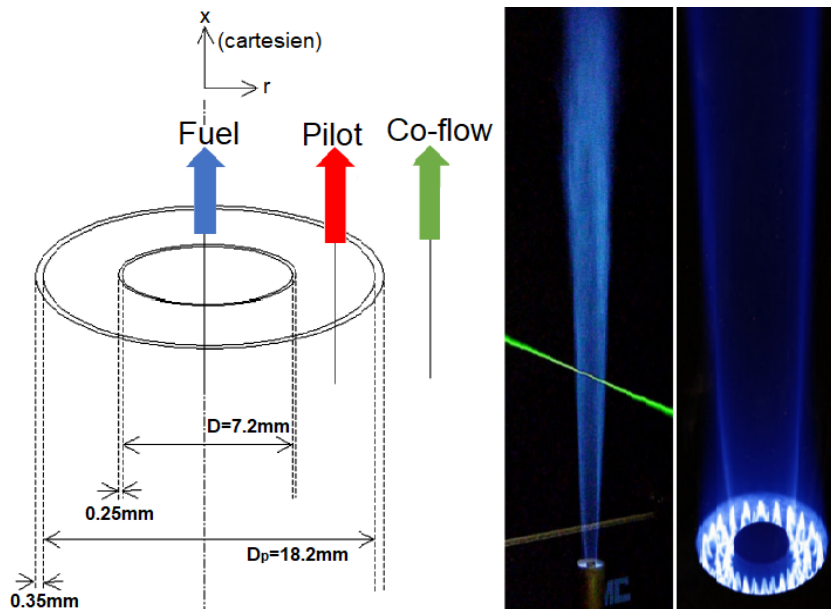


FIGURE 2.11 – Description de la configuration de la flamme D de Sandia.

Description du maillage de la géométrie

Un maillage axisymétrique 2D de type "wedge" conçu pour les simulations de type RANS, est composé de 32 000 cellules d'une part pour les simulations avec les modèles combustion EDC et PaSR et 28 000 cellules pour des simulations avec le modèle SLFM. La taille de domaine de 0,9 m et 0,15m dans les directions axiale et radiale, respectivement. Le maillage illustré à la figure 2.12, a une épaisseur d'une cellule dans la direction azimutale d'angle de 5°.

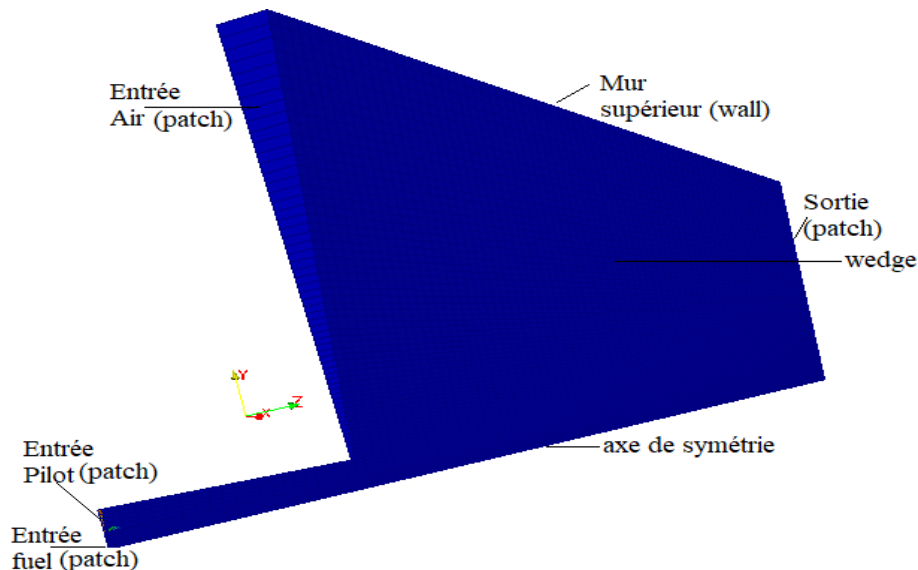


FIGURE 2.12 – Détails du maillage 2D de la flamme D de Sandia : maillage de type "wedge".

La grille est conçue pour être très fine au niveau du jet du combustible et dans les régions de mélange près de l'entrée pour résoudre les grands gradients locaux, et plus grossière dans le co-écoulement d'air et en aval pour économiser du temps de calcul. Le nombre de CFL est inférieur à 0,4 et correspond à un pas de temps physique de 1×10^{-5} s.

Le maillage 3D quant à lui est généré pour les simulations à grandes échelles (LES), avec le modèle SLFM (voir figure 2.13). Le nombre de maille est de $120 \times 90 \times 64$ respectivement dans les directions axiale, radiale et circumférentielle. En ajoutant au nombre de maille du petit tube à l'entrée qui est de 5760 ($10 \times 9 \times 64$), on a

toute la géométrie qui est constituée au total de 663040 cellules.

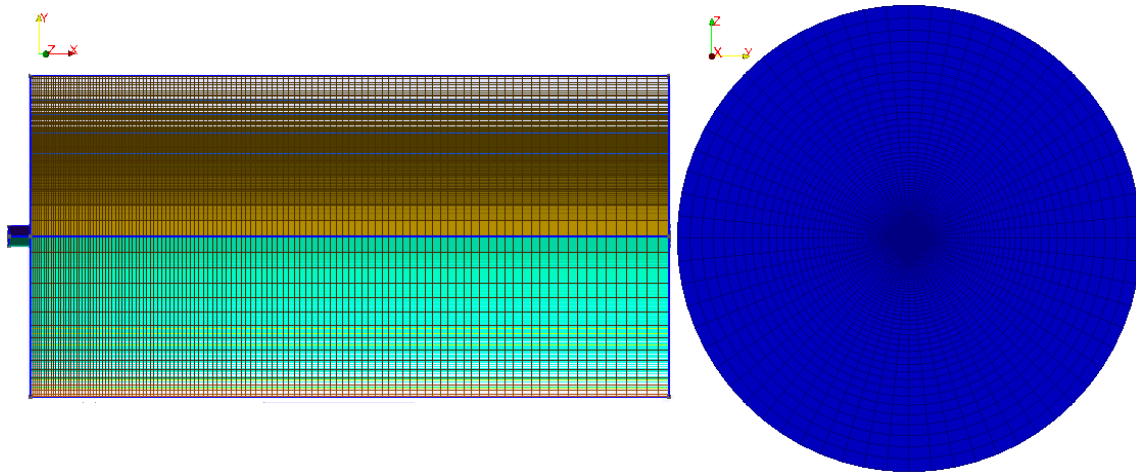


FIGURE 2.13 – Détails du maillage 3D de la flamme D de Sandia : description de la grille dans les plans $x - y$ et $y - z$.

Conclusion

Dans ce chapitre la présentation des équations de l'aérothermochimie, couramment utilisées en combustion, est un préalable pour la description des modèles de combustion EDC, PaSR et SLFM et de turbulence de type RANS ($k - \omega$, $k - \varepsilon$ standard et ses variantes) et de type LES (Smagorinsky). Le couplage de ces modèles avec les mécanismes squelettiques obtenus par dérivation et simplification du mécanisme détaillé GRI 3.0 à l'aide des méthodes de réduction présentées dans ce chapitre, constituent le cœur de notre travail. OpenFOAM et cantera sont les codes ayant servi à l'implémentation des modèles et à la simulation des flammes. Ce chapitre s'achève par la présentation des configurations expérimentales utilisées pour valider nos résultats de simulation qui seront présentés dans le chapitre suivant.

Chapitre 3

Chapitre 3

Résultats et Analyses : Réductions des Mécanismes, Simulations des Flamme Turbulentes et Applications aux Biogaz

Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation des résultats et analyses de la réduction de la cinétique chimique de combustion, utilisée pour la simulation de trois flammes turbulentes (de différentes conditions expérimentales), à partir desquelles seront appliquées la combustion des biogaz. Nous présentons dans la première section, les mécanismes squelettiques dérivés du mécanisme détaillé du GRI 3.0, par la méthode de réduction multi-étapes. Des comparaisons du point de vue d'une flamme laminaire contre-courant, sont préalablement faites entre le mécanisme squelettique et le détaillé. Dans la deuxième section, nous présentons les résultats obtenus des simulations pour la validation des mécanismes dans trois configurations et conditions différentes. La première flamme présentée est celle de la "DLR-A" de Sandia, dans laquelle l'influence des mécanismes cinétiques et celle des modèles de turbulence sont étudiées. Dans un second temps, d'autres études sont menées à l'aide de la flamme D de Sandia. Dans un premier temps, une confrontation entre le mécanisme squelettique du DRG et celui du GRI 3.0 est faite en comparant les modèles de combustion EDC et PaSR. Dans un second temps, la comparaison des mécanismes squelettiques et détaillé est faite, cette fois-ci à l'aide du modèle de combustion SLFM, par simulation RANS d'une part et LES d'autre part, dans l'espace physique et l'espace de la fraction de mélange. Après validation des mécanismes de combustion, des applications à la combustion des biogaz issus des lisiers de vache, de mouton et de porc, sont faites et présentées dans la troisième section de ce chapitre. Ici, le méthane est remplacé par le biogaz dans les combustibles initiaux de la flamme "DLR-A" et la flamme D.

3.1 Réduction des Mécanismes Chimiques

Les mécanismes squelettiques obtenus dans ce travail dérivent tous du mécanisme du GRI 3.0, avec lequel ils sont préalablement comparés dans les simulations d'une structure de flamme laminaire de diffusion à contre-courant. Cette comparaison permet de juger de la capacité du mécanisme squelettique réduit à reproduire le comportement du mécanisme détaillé. Le modèle des "flammelette" est à la base des simulations de ces flammes dans l'espace du taux de dissipation (ou de déformation) et de la fraction de mélange.

3.1.1 Mécanisme squelettique appliqué à l'Oxy-Méthane

Les travaux de recherche de la thèse de Bomba [47], sont à la base des méthodes de cinétiques chimiques développées dans cette thèse dont le but est de faire la réduction de manière efficace, optimale et ciblée des mécanismes détaillés pour des applications CFD. L'objectif principal de ses travaux était le développement d'une nouvelle méthode multi-étape d'élimination des réactions à partir des mécanismes détaillés. Cette méthode multi-étape de réduction squelettique est constituée de la méthode de graphe de relation dirigée (DRG), l'analyse de sensibilité assistée par DRG (DRGASA), l'élimination de la réaction sans importance par une nouvelle méthode basée sur le DRGASA. Les principaux résultats obtenus dans ses travaux de recherche présentent des modèles de chimie réduite, efficace et optimale pour la combustion non pré-mélangée de combustibles hydrocarbonés dans de l'oxygène pur plutôt que de l'air. À cet effet, l'élaboration d'un mécanisme réduit dérivé du GRI 3.0 et constitué de 39 étapes de réactions élémentaires et 21 espèces appliquées à la configuration OXYFLAM-2 A a été effectué.

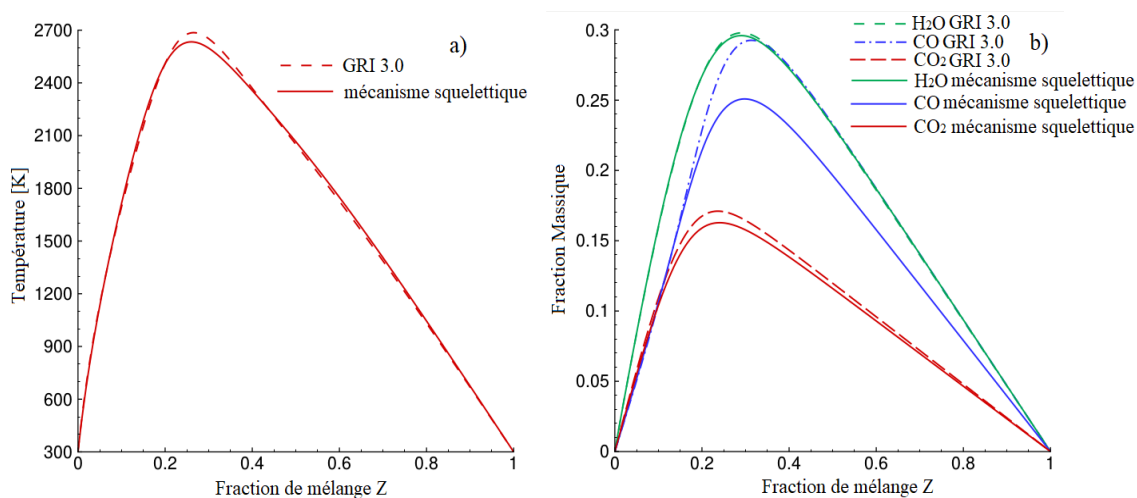


FIGURE 3.1 – Profils de température et prédits calculés en utilisant le mécanisme GRI3.0 et le mécanisme squelettique pour une flamme de diffusion oxy-méthane : 100% O₂ contre 100% CH₄ et une vitesse de déformation de 62 000 s⁻¹.

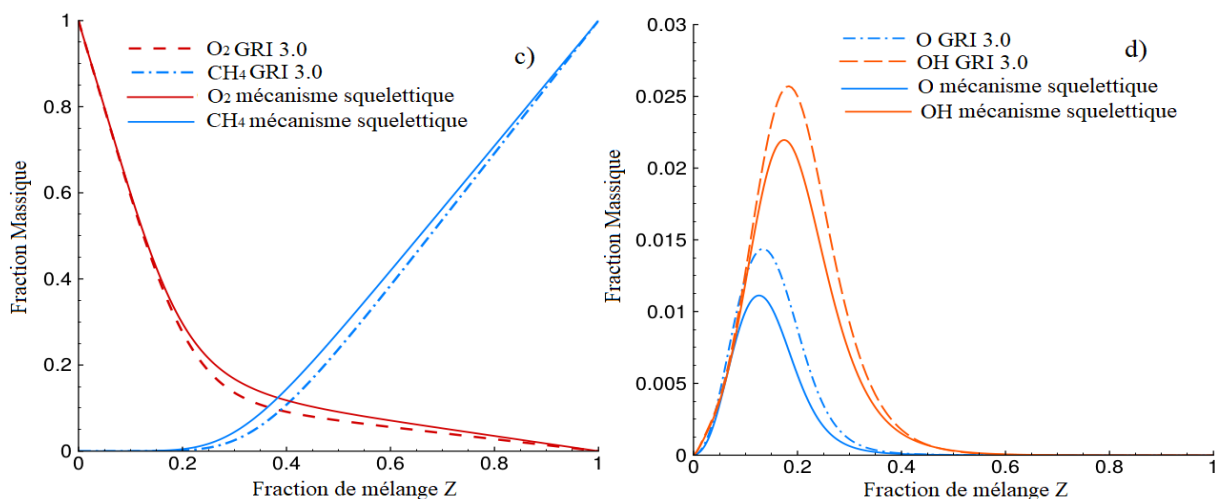


FIGURE 3.2 – Profils de réactifs et radicaux prédits, calculés en utilisant le mécanisme GRI3.0 et le mécanisme squelettique pour une flamme de diffusion oxy-méthane : 100% O₂ contre 100% CH₄ et une vitesse de déformation de 62 000 s⁻¹.

Les figures 3.1 à 3.2 montrent les résultats de la structure de flamme obtenus avec le mécanisme GRI3.0 et le mécanisme squelettique pour une flamme non prémélangée d'oxy-méthane (100% O₂ et 100% CH₄) à un

taux de déformation proche de l'extinction, $\chi = 62\,000\text{ s}^{-1}$. On voit sur ces graphiques que les prédictions du mécanisme squelettique sont, dans l'ensemble, en bon accord avec celles obtenues par le mécanisme détaillé de départ, c'est-à-dire le mécanisme GRI3.0. La différence au niveau des pics de température à la figure 3.1(a) est due au fait que la non prise en compte des NOx par le mécanisme réduit, conduit à un pic de température plus faible. À la figure.3.1(b), à droite, nous avons les profils de fraction massique des produits de combustion H₂O, CO₂ et CO. On constate un très bon accord pour les trois espèces. La même observation est faite sur les profils des réactifs et des radicaux observés à la figure. 3.2 (c-d).

Il s'agit pour nous dans ce travail, d'effectuer une application CFD de ce mécanisme à la flamme indiquée (OXYFLAM-2 A), dont les résultats sont présentés dans la section 3.2.2.

3.1.2 Mécanisme Squelettique de la flamme "CH₄/H₂/N₂-DLR-A"

Un mécanisme squelettique compact taillé selon la configuration de la flamme DLR-A est conçu dans le présent travail. Elle est générée en prenant une température aux entrées de 292 K et une pression de 990 mbar comme indiquées par les données expérimentales de la flamme DLR-A [2]. Ainsi, le mécanisme squelettique compact, dérivé d'un code de réduction interne, permet de modéliser avec précision les processus chimiques dans un environnement turbulent, en considérant les conditions aux limites de la flamme. La mise en œuvre de l'approche de réduction en quatre étapes avec le GRI3.0 comme mécanisme de départ conduit à un mécanisme squelettique compact constitué de 51 réactions élémentaires pour 21 espèces, à savoir H₂, H, O, O₂, OH, H₂O, HO₂, CH₂, CH₂(S), CH₃, CH₄, CO, CO₂, HCO, CH₂O, C₂H₂, C₂H₄, C₂H₅, C₂H₆, N₂ et AR.

Les résultats de l'étape de validation dans une flamme laminaire sont présentés dans les figures 3.3 et 3.4. Ces résultats concernent la comparaison du mécanisme squelettique dérivé par rapport au mécanisme détaillé de départ, c'est-à-dire le mécanisme GRI3.0. On peut voir sur ces figure que le mécanisme squelettique reproduit avec une très bonne précision les caractéristiques du mécanisme GRI3.0. Plus précisément, la Fig. 3.3(a) montre la température maximale de la flamme en fonction de la vitesse de déformation.

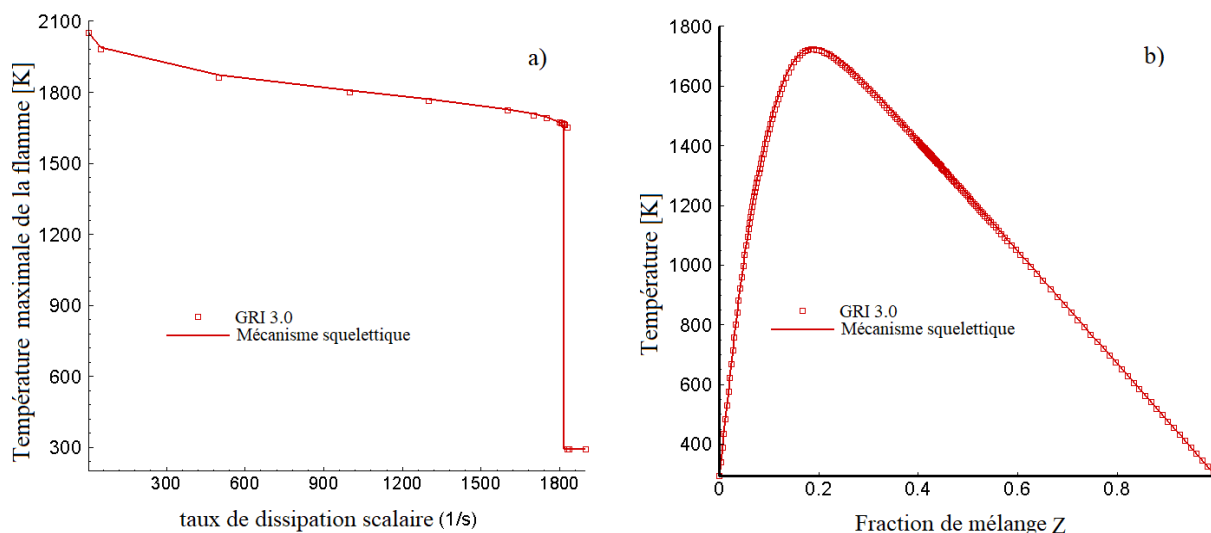


FIGURE 3.3 – Comparaison des distributions de température dans l'espace de fraction de mélange obtenues avec le mécanisme squelettique C₂ (21 espèces et 51 réactions) et le mécanisme GRI3.0 (53 espèces et 325 réactions) appliqués aux conditions de la flamme DLR-A.

On voit sur ce graphique que la courbe solide obtenue avec le mécanisme squelettique s'accorde très bien avec les symboles obtenus avec le mécanisme GRI3.0. De plus, la vitesse de déformation d'extinction $a_q = 1829\text{ s}^{-1}$ est prédite avec une excellente précision par le mécanisme squelettique.

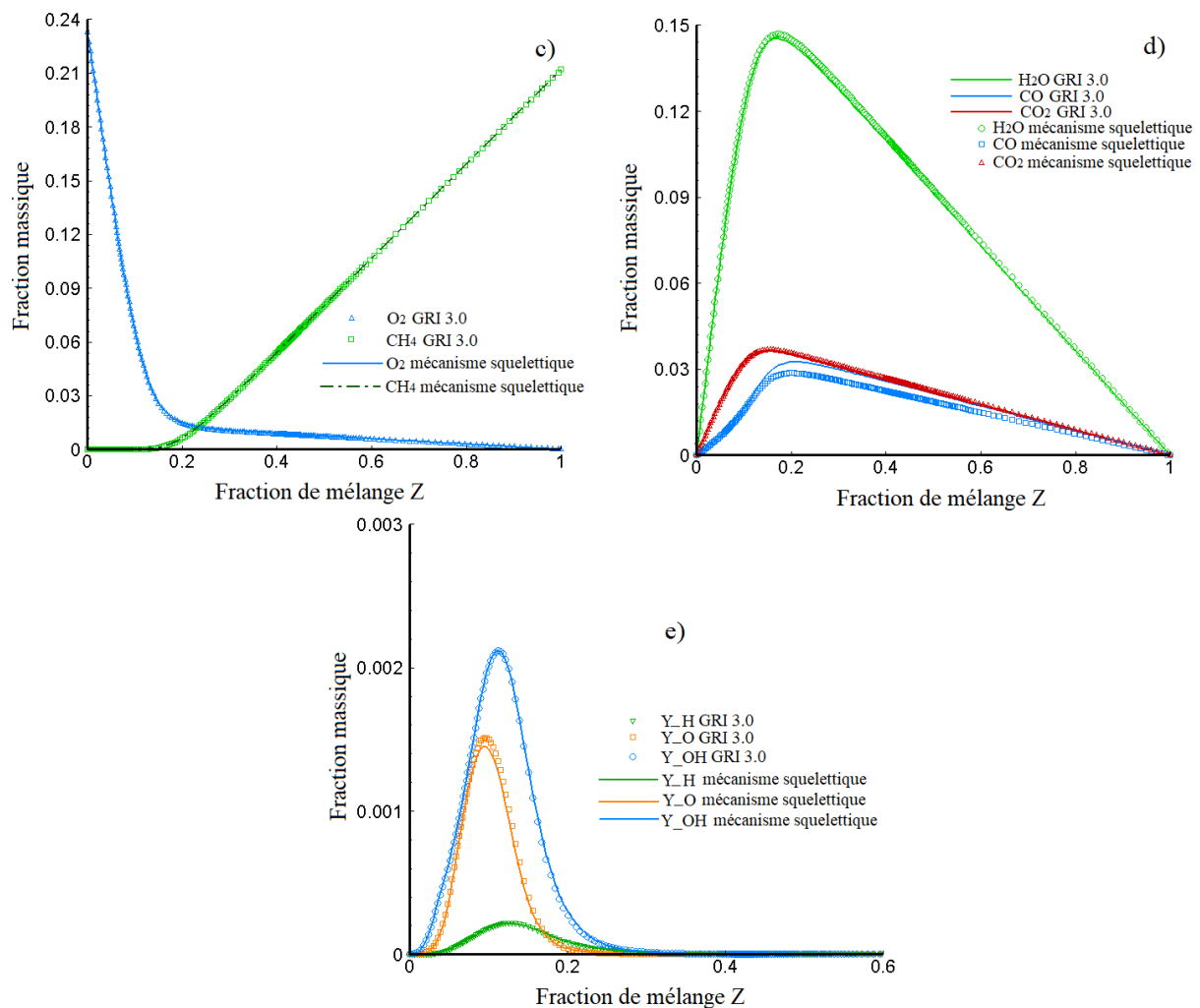


FIGURE 3.4 – Comparaison des distributions des espèces (réactifs, produits et radicaux) dans l'espace de fraction de mélange obtenues avec le mécanisme squelettique C₂ (21 espèces et 51 réactions) et le mécanisme GRI3.0 (53 espèces et 325 réactions) appliqués aux conditions de la flamme DLR-A.

Les figures 3.3(b)-3.4(c)-(d) montrent les profils de température et des fractions massiques prédites des principales espèces, réactifs et produits de combustion dans l'espace de fraction de mélange, tels qu'obtenus avec les mécanismes squelettiques et GRI3.0 pour un taux de déformation proche de l'extinction de 1600 s^{-1} . On peut voir sur ces graphiques que les prédictions du mécanisme squelettique et du mécanisme GRI3.0 sont en bon accord. Un bon accord similaire est obtenu pour les espèces intermédiaires clés, telles que O, H, et OH (figure 3.4(e)).

Mécanisme appliqué à la flamme Sandia D

En partant de la méthode de réduction multi-étape du type DRG et selon les conditions aux limites de la flamme D de Sandia, nous avons conçu un autre mécanisme dérivé du GRI 3.0 et comportant 47 étapes réactionnelles et 20 espèces. Ces espèces sont les suivants : H₂, H, O, O₂, OH, H₂O, HO₂, CH₂, CH₂(S), CH₃, CH₄, CO, CO₂, HCO, CH₃O, C₂H₂, C₂H₄, N₂, AR et C₂H₆.

3.1.3 Bibliothèque des flammelettes

Pour les simulations de la flamme D par le modèle de combustion SLFM, les bibliothèques des "flammelettes" sont obtenues à l'aide des mécanismes détaillés GRI 3.0 et squelettiques du DRG Multi-étapes. Les courbes de la figure. 3.5 présentent les températures dans l'espace de la fraction de mélange. Ces courbes ont

la même forme et les maximums de températures décroissent lorsque le taux de dissipation du scalaire augmente. L'extinction était constatée pour les deux bibliothèques lorsque le taux de dissipation était autour de 450 s^{-1} .

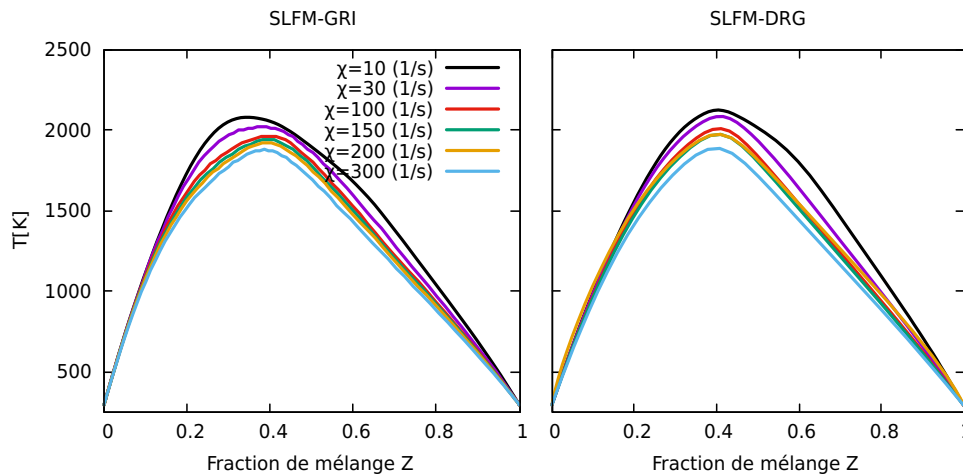


FIGURE 3.5 – Profils de température issue des bibliothèques de flammelettes de la flamme D de Sandia avec les mécanismes GRI 3.0 et squelettiques du DRG.

3.2 Résultats des Simulations Numériques CFD

Il existe des possibilités dans OpenFOAM, pour l'exécution des calculs parallèles. Cette parallélisation des processeurs est basée sur un modèle de programmation par échange des messages, "Message Passing Interface" (MPI) qu'offre OpenFOAM à l'aide de la commande "mpirun". Ce qui permet de partager les tâches à exécuter aux différents processeurs et réduire ainsi le temps de calcul. L'ordinateur utilisé comporte 8 cœurs (de 6-ième génération) de fréquence 3,2 GHz chacun et une mémoire vive de 16 Go. En fonction du nombre de mailles utilisés, de la configuration de la flamme et du mécanisme employé, il a fallu environ 3 heures à 4 jours pour que nos simulations numériques (RANS) soient statistiquement convergentes.

3.2.1 Simulations de la Flamme de "DLR-A" Sandia

Les simulations de la flamme "DLR-A", sont effectuées avec le solveur de combustion du nom de "reactingFoam". Le maillage conçu dans le code open-source "gmsh" est introduit dans le dossier de calcul sous l'extension ".msh" et converti dans OpenFOAM à l'aide de la commande "gmshToFoam" suivi du nom du fichier ".msh". Une fois le maillage généré, les conditions aux limites et les propriétés de calculs définies, les calculs sont effectués à l'aide de la commande : `mpirun -np nombre de processeurs utilisés reactingFoam -parallel`.

Application d'un mécanisme squelettique compact du type DRG multi-étapes

La présente étude évalue les capacités d'un mécanisme squelettique compact, dérivé d'un mécanisme détaillé à l'aide d'un code de réduction interne, de modéliser avec précision les processus chimiques dans une flamme $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ turbulente. Cette étude numérique est réalisée en utilisant l'approche Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) et un mécanisme squelettique compact de 51 réactions élémentaires pour 21 espèces (voir section 3.1.2). Le modèle $k - \varepsilon$ est utilisé pour la fermeture des équations RANS, tandis que les termes sources dans les équations de transport d'espèces et d'énergie sont fermés par le modèle de réacteur partiellement agité (PaSR). Le rayonnement est modélisé par le modèle $P-1$.

La figure 3.6 montre la distribution radiale de la vitesse moyenne à des différentes positions axiales ($X/D = 5, 10, 20, 40$) dans le temps. Les vitesses radiales moyennes sont relativement en bon accord quan-

titatif à tous les emplacements axiaux avec l'expérience. Les valeurs axiales sont sous-estimées de manière générale aux différentes positions. La sous-estimation est également observée près de la couche de cisaillement. Elle doit être due à une mauvaise estimation du mélange près de la couche de cisaillement.

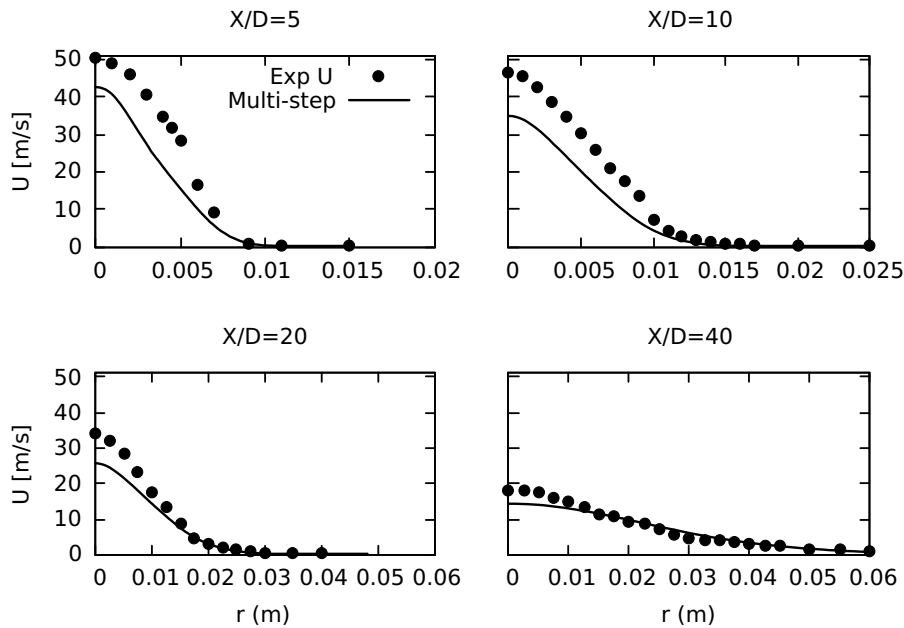


FIGURE 3.6 – Distributions radiales de la vitesse à quatre endroits X/D différents.

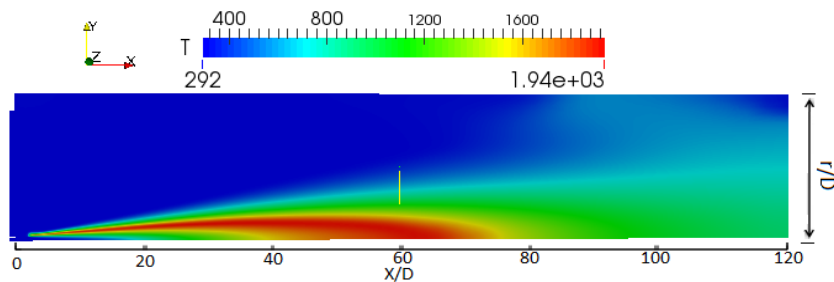


FIGURE 3.7 – Contours calculés de la température moyenne [K].

La figure 3.7 montre les contours calculés de la température moyenne. On peut voir sur cette figure que la flamme présente un décollement à l'entrée du brûleur. De plus, la flamme est mince près de la buse et augmente avec les positions en aval. Suivant l'axe de la flamme, les calculs prédisent une température maximale de $1910K$ à la position axiale $X/D = 62$. Ces résultats sont proches des données expérimentales de la flamme DLR-A dont le pic de flamme mesuré a pour température $1842K$; elle se situe à la position axiale $X/D = 60$. On peut remarquer que le calcul surestime légèrement la température maximale de la flamme de $68K$, ce qui donne une erreur relative de 3,56%.

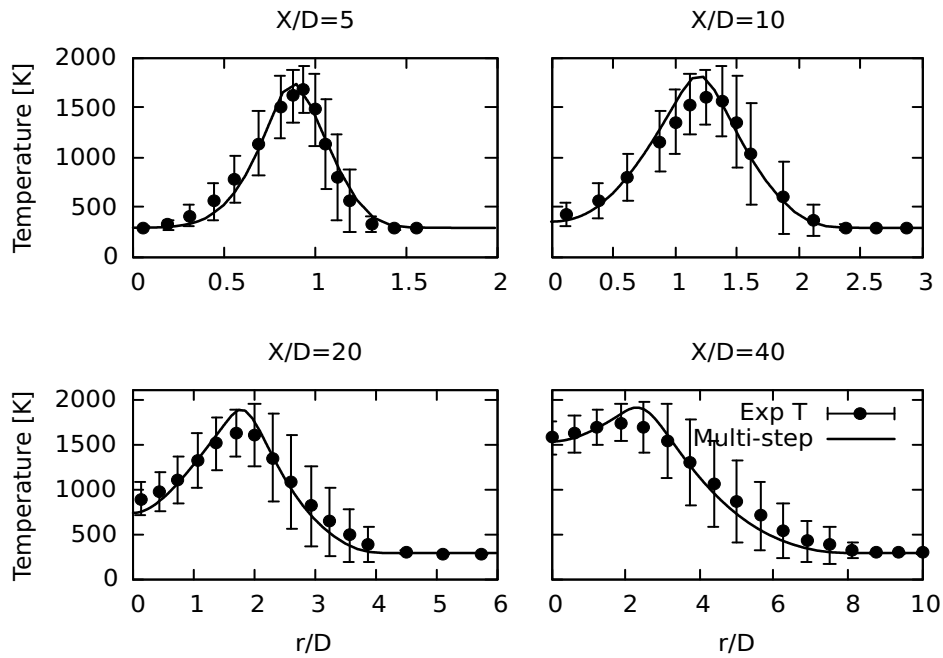


FIGURE 3.8 – Profils radiaux de la température pour la DLR-A, aux positions axiales $X/D = 5, 10, 20$ et 40 ; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

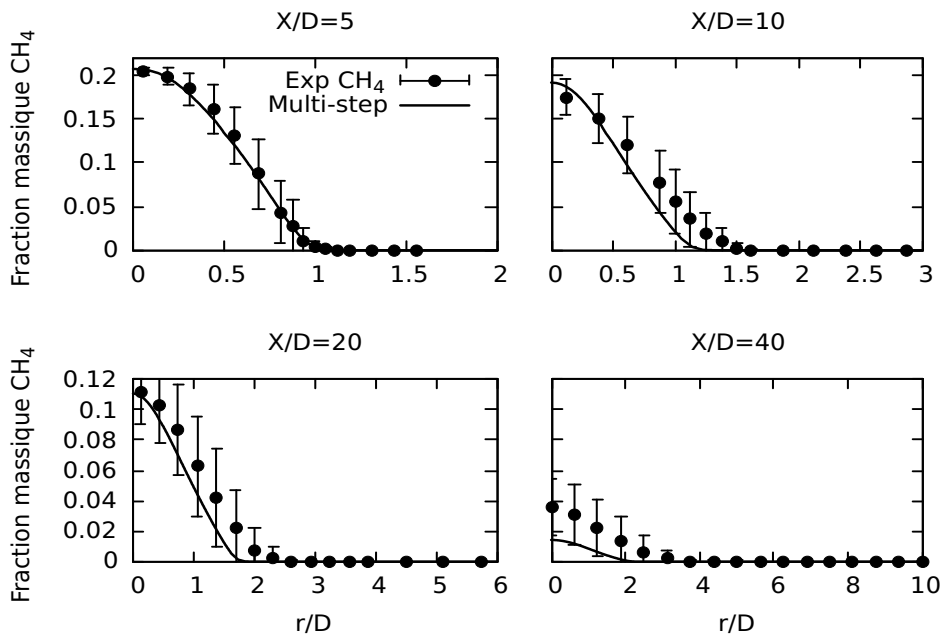


FIGURE 3.9 – Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce CH_4 pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40 ; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

Les courbes montrées dans les figures 3.8 à 3.14 sont des résultats de la structure moyennée de la flamme en termes de profils radiaux de température et de fraction massique d'espèces sélectionnées pour la flamme DLR-A. Dans chacune de ces figures, les profils prédits de température et de fraction massique des espèces obtenus avec le mécanisme squelettique compact sont comparés aux données expérimentales à quatre positions axiales, à savoir, $X/D = 5, 10, 20$ et 40 . Plus précisément, la figure 3.8 montre une comparaison des profils de température obtenus avec le mécanisme squelettique compact et les mesures. On peut voir sur le graphique que le profil radial prédit de la température et de la valeur maximale correspond très bien aux données expéri-

mentales près de la buse ($X/D = 5$). Les écarts mineurs observés pour la température maximale de la flamme plus en aval aux positions axiales $X/D = 10, 20$ et 40 restent néanmoins dans l'incertitude expérimentale.

La figure 3.9 montre les profils radiaux de la fraction massique moyenne de CH_4 avec la réduction multi-étape DRG. Il présente un accord acceptable avec l'expérimental. D'un autre côté, les profils de fraction massique moyenne H_2 , illustrés à la figure 3.10, présentent de manière générale une bonne allure en comparaison à l'expérimental.

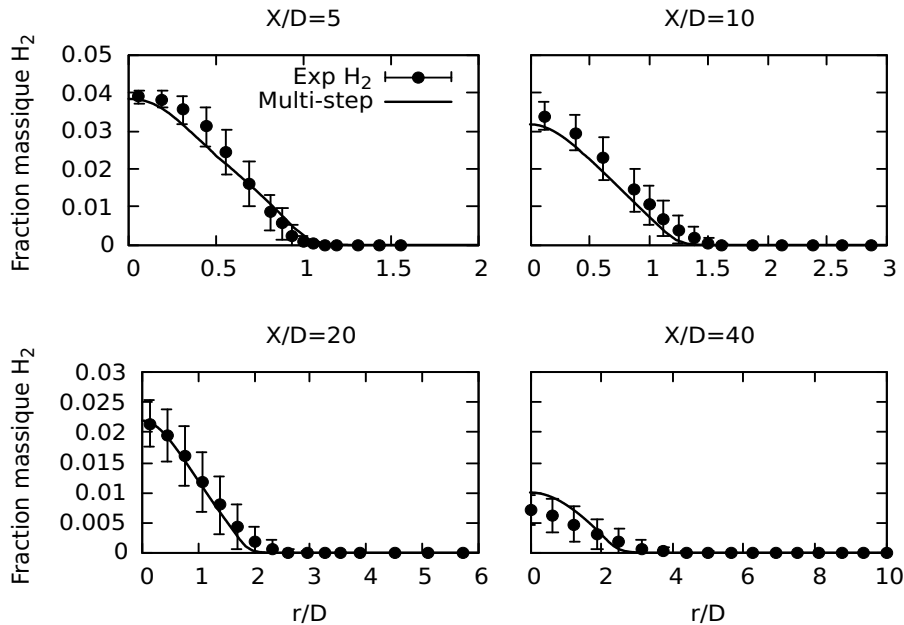


FIGURE 3.10 – Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce H_2 pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40 ; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

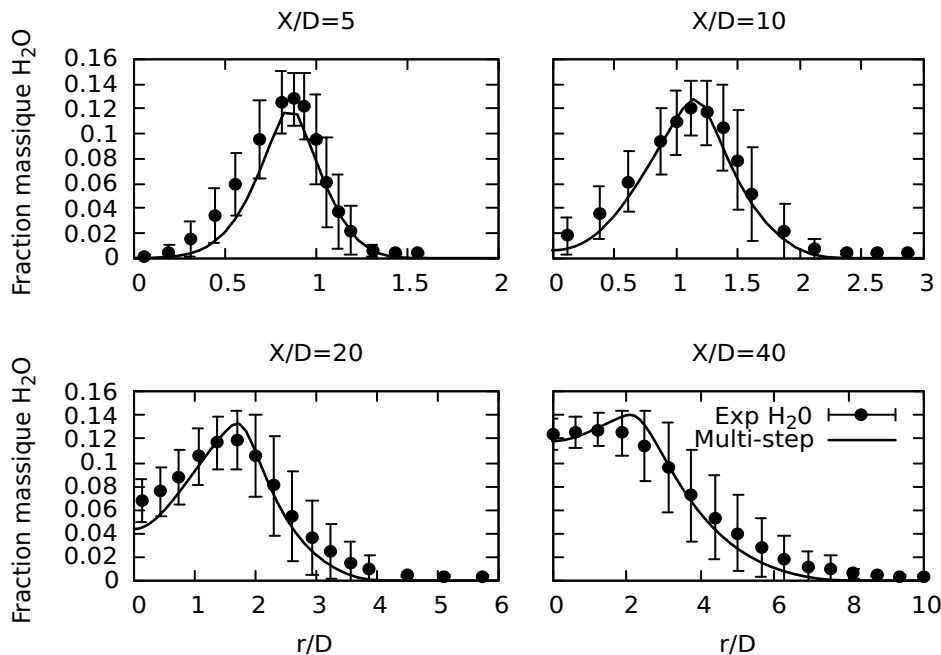


FIGURE 3.11 – Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce H_2O pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40 ; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

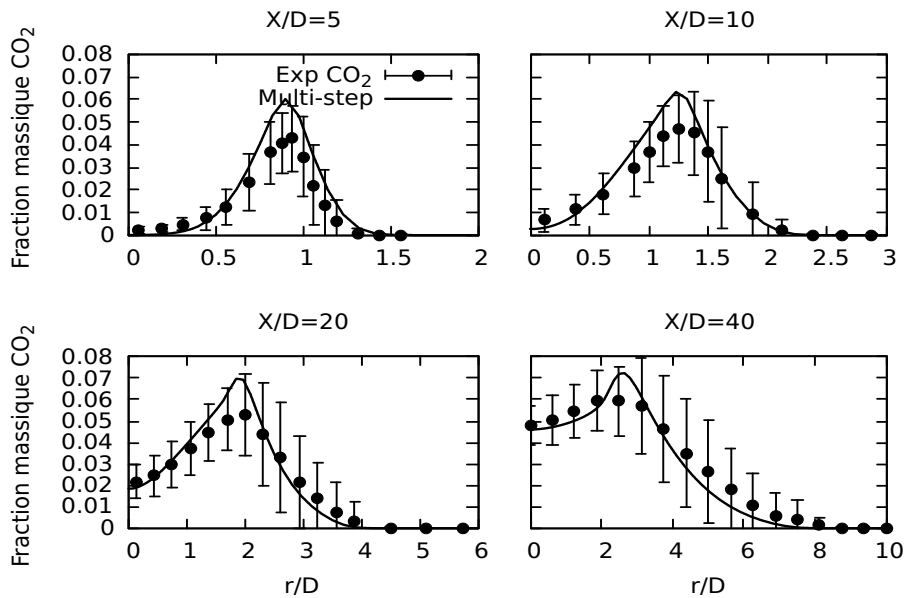


FIGURE 3.12 – Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce CO_2 pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5$, 10, 20 et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

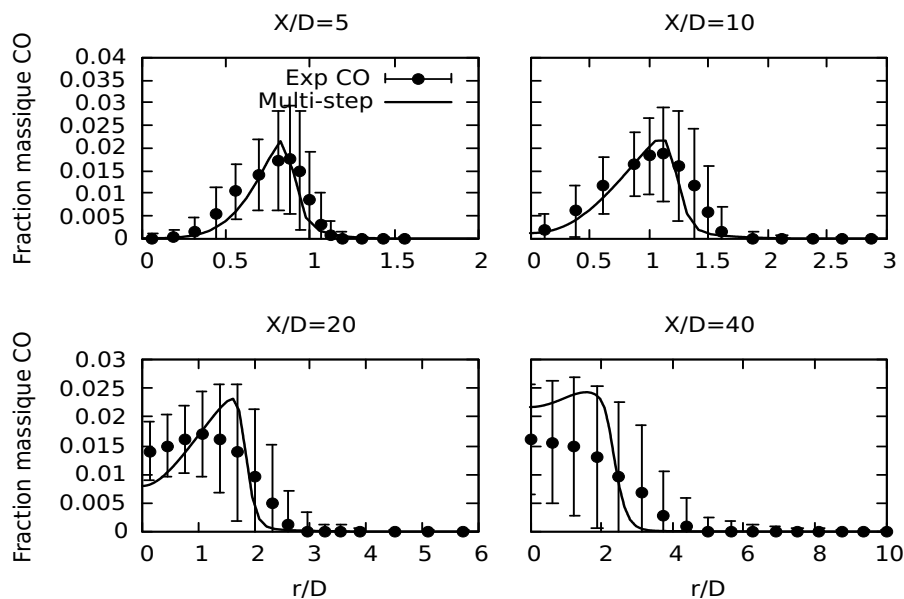


FIGURE 3.13 – Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce CO pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5$, 10, 20 et 40; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

Les profils de fraction massique mesurés et prédits des espèces H_2O sont illustrés à la figure 3.11. On voit que la forme et la valeur de crête du profil prédit concordent très bien avec la mesure. La figure 3.12 montre une comparaison entre les profils de fraction massique mesurés et prédits des espèces de CO_2 . On voit de même sur cette figure que les profils de la fraction massique, prédite et mesurée, ont la même forme. Cependant, le profil calculé surestime légèrement la valeur de crête dans les quatre positions axiales sélectionnées. Une comparaison entre les profils de fraction massique mesurée et calculée des espèces de CO , est présentée sur la figure 3.13. On peut voir sur cette figure que bien que l'incertitude expérimentale pour le CO soit élevée (de l'ordre de 30 à 50%) [2], la prédiction du mécanisme est en assez bon accord avec les données expérimentales. Un bon accord similaire est obtenu pour les espèces OH et présenté sur la figure 3.14, bien qu'ici, les profils présentent quelques surestimation un peu au dessus des barres d'incertitudes.

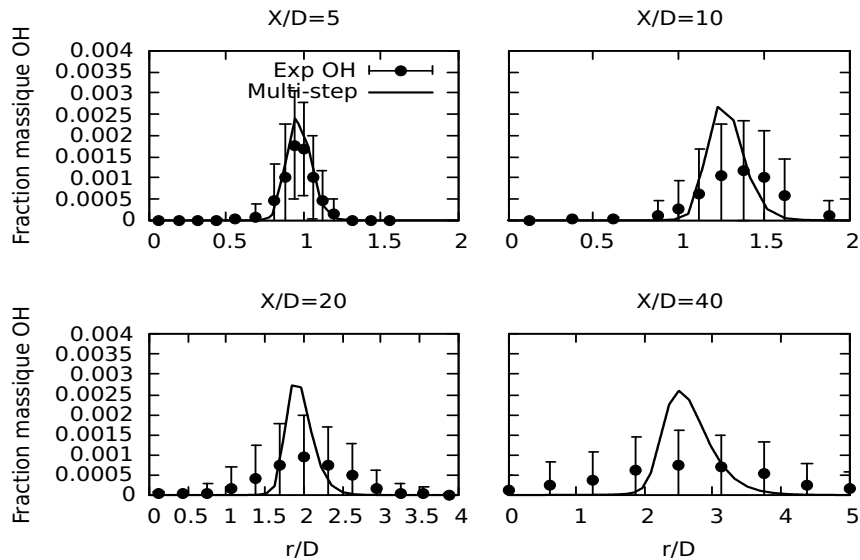


FIGURE 3.14 – Profils radiaux de la fraction massique de l'espèce OH pour la DLR-A, aux positions $X/D = 5, 10, 20$ et 40 ; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

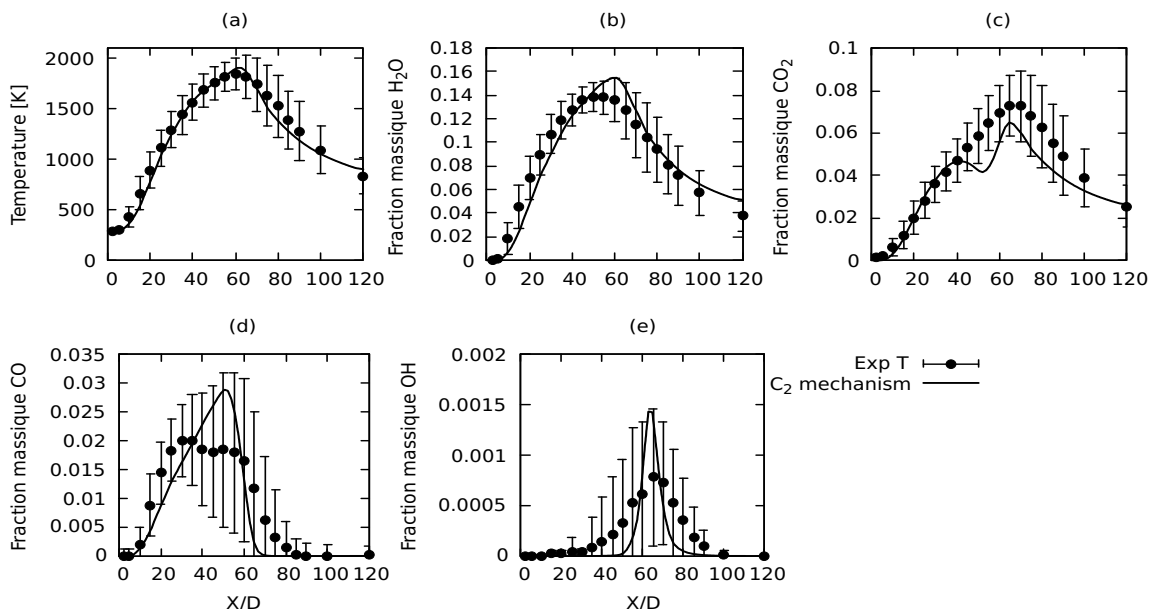


FIGURE 3.15 – Profil axial de la température et des fractions massiques des espèces H_2O , CO_2 , CO et OH ; données expérimentales (point avec barre d'erreur) et mécanisme squelettique (multi-étapes, ligne pleine). Les valeurs RMS sont utilisées pour tracer les barres d'incertitude.

La figure 3.15 présente les profils axiaux de température et de fraction massique des principaux produits de combustion, à savoir les espèces H_2O , CO_2 , CO et OH . Il ressort de tous ces graphiques que les profils prédits obtenus avec le mécanisme squelettique correspondent très bien aux données expérimentales dans la région de laminarisation (de la buse jusqu'à $X/D = 5$). Sur la Fig.3.15.(a) le profil de température axial calculé avec le mécanisme squelettique concorde très bien avec les données expérimentales jusqu'à la position axiale $X/D = 60$. Entre $X/D = 60$ et $X/D = 100$, le mécanisme squelettique sous-estime légèrement la température. Cependant, cet écart mineur reste dans l'incertitude expérimentale. Sur la Fig.3.15.(b), un bon accord global est obtenu entre les profils de fraction massique calculés et mesurés de H_2O . Ici aussi, les écarts mineurs sont observés. Par exemple, le mécanisme squelettique sous-estime la valeur maximale de la fraction massique de l'espèce H_2O . Cependant, cet écart est dans l'incertitude de mesure. Un moins bon

accord est obtenu entre la mesure et le profil de CO_2 calculé dans ce travail ; en particulier, le mécanisme squelettique sous-estime considérablement la fraction massique de CO_2 à partir de la position axiale $X/D = 40$. Bien entendu, la prise en compte de l'incertitude expérimentale pour le CO_2 (jusqu'à 10%) améliore l'accord global. De même, le profil de CO calculé avec le mécanisme squelettique ne correspond pas bien à la mesure correspondante. Cependant, un meilleur accord est obtenu si l'on considère la forte incertitude expérimentale pour le CO (de l'ordre de 30 à 50% [2]). On peut également voir sur la Fig.3.15.(e) que le profil axial calculé de l'espèce OH est reproduit correctement, c'est-à-dire dans les limites de l'incertitude obtenue par les données expérimentales [2]. En général, les résultats du calcul RANS présentés dans cette section indiquent que le mécanisme squelettique compact décrit avec une bonne précision les processus chimiques dans la flamme du DLR-A.

Étude de l'influence des modèles des mécanismes de cinétique chimique

Cette partie présente une étude de l'influence des mécanismes chimiques et les modèles de turbulence sur les simulations moyennées "Reynolds-Averaged Navier-Stokes" (RANS) de la flamme de diffusion turbulente dite "DLR-A" précédemment étudiée. La première partie de cette étude est centrée sur l'évaluation de l'influence de quatre modèles chimiques sur les profils prédits de la flamme du DLR-A. Les mécanismes chimiques considérés sont les suivants : (i) un mécanisme squelettique compact C_2 , qui est dérivé du mécanisme GRI3.0 [126] en utilisant la méthode améliorée de réduction multi-étapes, (ii) un mécanisme squelettique C_1 de Yang et Pope [83] contenant 41 réactions élémentaires parmi 16 espèces, (iii) le mécanisme global de Jones et Lindstedt [175], (iv) et un schéma global constitué des réactions globales du méthane et du dihydrogène [177]. Les résultats numériques RANS (par exemple, les vitesses, la température, les espèces ou les profils de taux de production de chaleur) obtenus en exécutant le solveur "reactingFoam" avec les quatre mécanismes chimiques ainsi que le modèle $k - \varepsilon$ standard, le modèle de combustion du réacteur partiellement agité (PaSR), et le modèle de rayonnement $P-1$.

Le tableau 3.1 montre les temps d'exécution moyens par itération dans nos calculs pour chaque mécanisme chimique utilisé. Nous pouvons voir dans le tableau 3.1 que le temps de calcul augmente avec la taille du mécanisme chimique et par conséquent, les calculs avec le mécanisme en deux étapes nécessitent moins de temps CPU par rapport à ceux avec des mécanismes squelettiques.

Tableau 3.1 – Temps d'exécution moyens par itération.

Mécanismes chimiques	Espèces	Réactions	Temps d'exécution [s]
Schéma squelettique C_2	21	51	1.82
Schéma squelettique C_1	16	41	1.76
Schéma de Jones et Lindstedt	7	4	0.86
Schéma global 2-étapes	6	2	0.28

La figure 3.16 présente les contours des températures des flammes obtenus par les quatre schémas cinétiques mentionnés précédemment. On observe que les longueurs de flamme prédites sont quasiment du même ordre. En outre, on observe un décollement de la flamme à la sortie de la buse, pour les mécanismes squelettiques. Ce qui pourrait s'expliquer par la prise en compte du délais d'ignition par les mécanismes de plus grandes tailles, comparés aux mécanismes globaux.

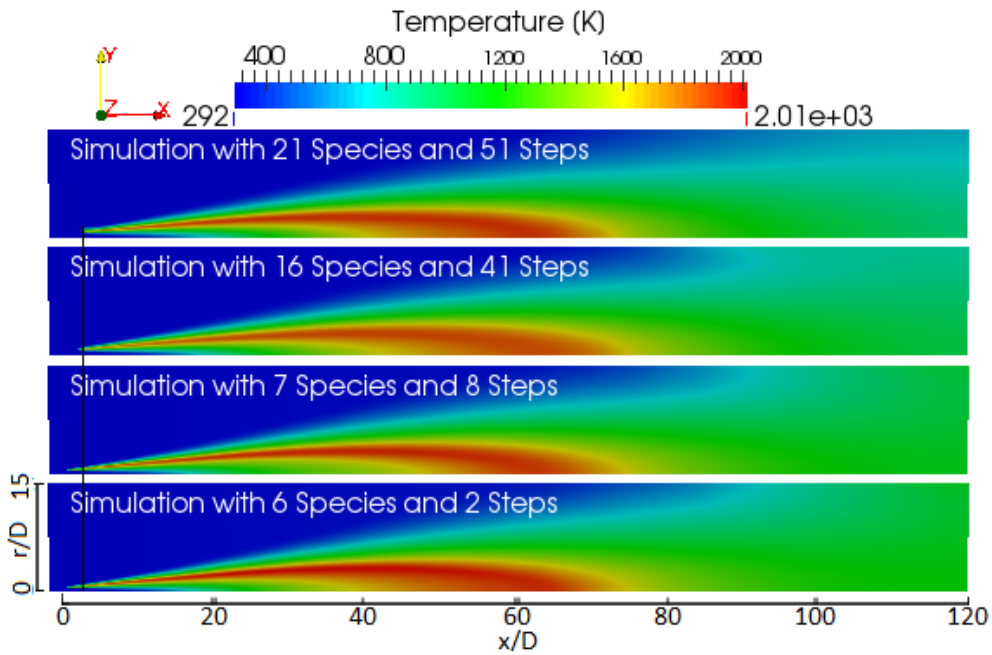


FIGURE 3.16 – Contours de température moyenne avec différents mécanismes.

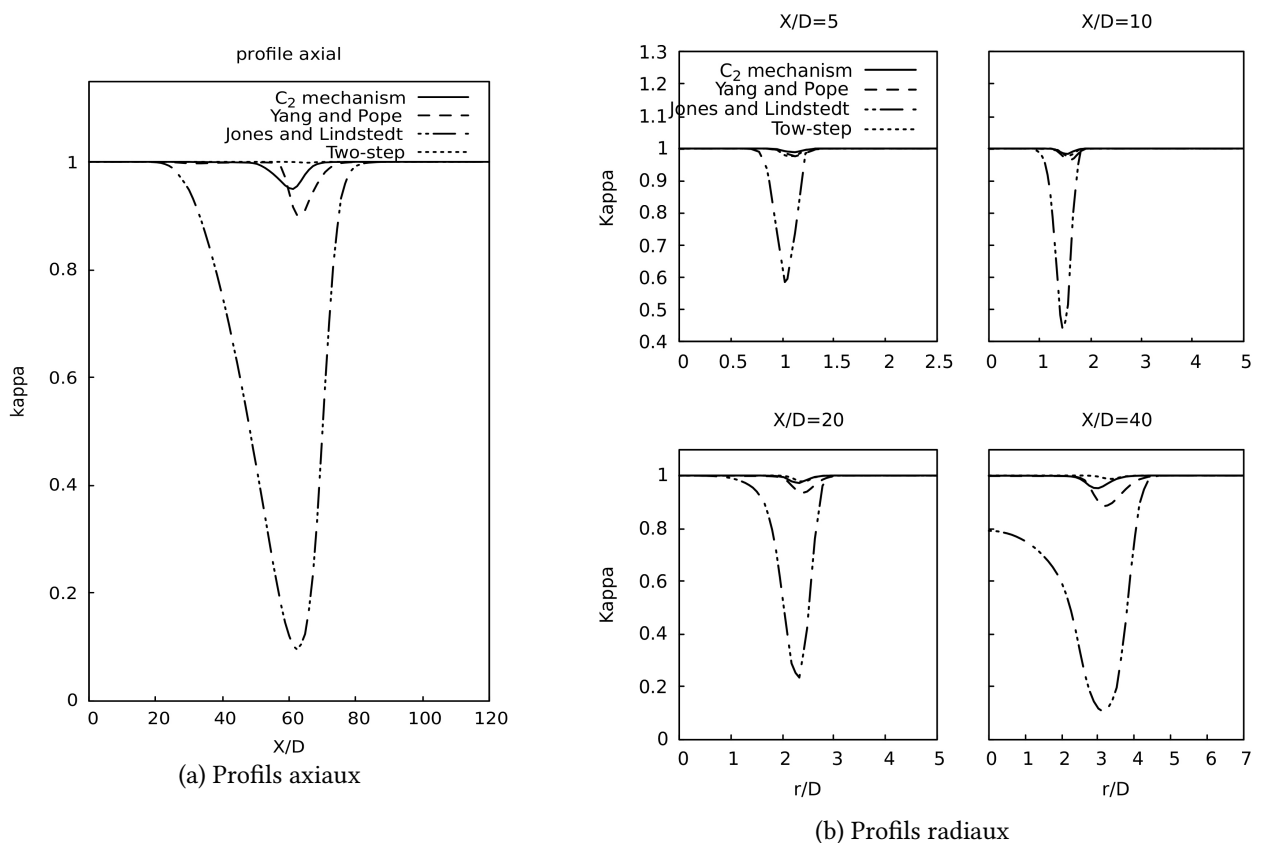


FIGURE 3.17 – Profils axiaux et radiaux de la fraction réactive κ décrit dans le modèle PaSR.

La figure 3.17 montre les distributions de la fraction massique réactive κ , décrivant le mélange réactionnel suivant les profils axiaux et radiaux. La fraction réactive peut s'écrire sous la forme :

$$\kappa = \frac{1}{\frac{\tau_{mix}}{\tau_{ch}} + 1} = \frac{1}{Da + 1} \tag{3.1}$$

où $Da = \tau_{mix}/\tau_{ch}$ est le nombre de Damkoler. κ est un paramètre qui révèle explicitement la comparaison

entre le temps de réaction chimique (τ_{ch}) et le temps total de conversion, qui est la somme du temps de micromélange ou le temps caractéristique de turbulence (τ_{mix}) et le temps τ_{ch} . De ce point de vue, il constitue un paramètre de flux local pouvant permettre la description de la structure de la flamme locale. On peut voir sur la figure 3.17 qu'il existe deux catégories de régions : (i) les régions caractérisées par $\kappa \approx 1$, c'est-à-dire $\tau_{mix} \ll \tau_{ch}$ ou $Da \ll 1$. Dans cette région, la flamme locale est considérée comme parfaitement agitée. On se rapproche donc dans ce cas du modèle de mélange, «Perfectly Stirred Reactor» (PSR). Cela suggère que les vitesses de mélange sont très élevées ou que les vitesses de réaction chimique sont très lentes. La vitesse de combustion est dominée par la cinétique chimique du mélange ; le processus de mélange peut être négligé et la chimie devient le phénomène dominant. (ii) Dans les régions caractérisées par $\kappa < 1$, lorsque $Da \gg 1$, le temps chimique est largement inférieur au temps caractéristique de la turbulence. La conséquence principale est que la structure interne de la flamme ne peut être modifiée par les tourbillons. Ces tourbillons seraient observables si les simulations étaient du type LES ou instantanées. Pour chaque mécanisme chimique, l'emplacement de la valeur minimale se situe autour de la position $X/D = 60$, qui correspond à l'emplacement de la température maximale de la flamme. Il s'agit de la zone de température maximale de la flamme. Dans de telles régions, de très fortes déformations de la flamme se produisent. Toutefois, la structure de cette flamme, pourrait mieux être étudiée avec un schéma de simulation de type LES, ou DNS, puisque l'approche RANS ne décrit que les grandeurs moyennes.

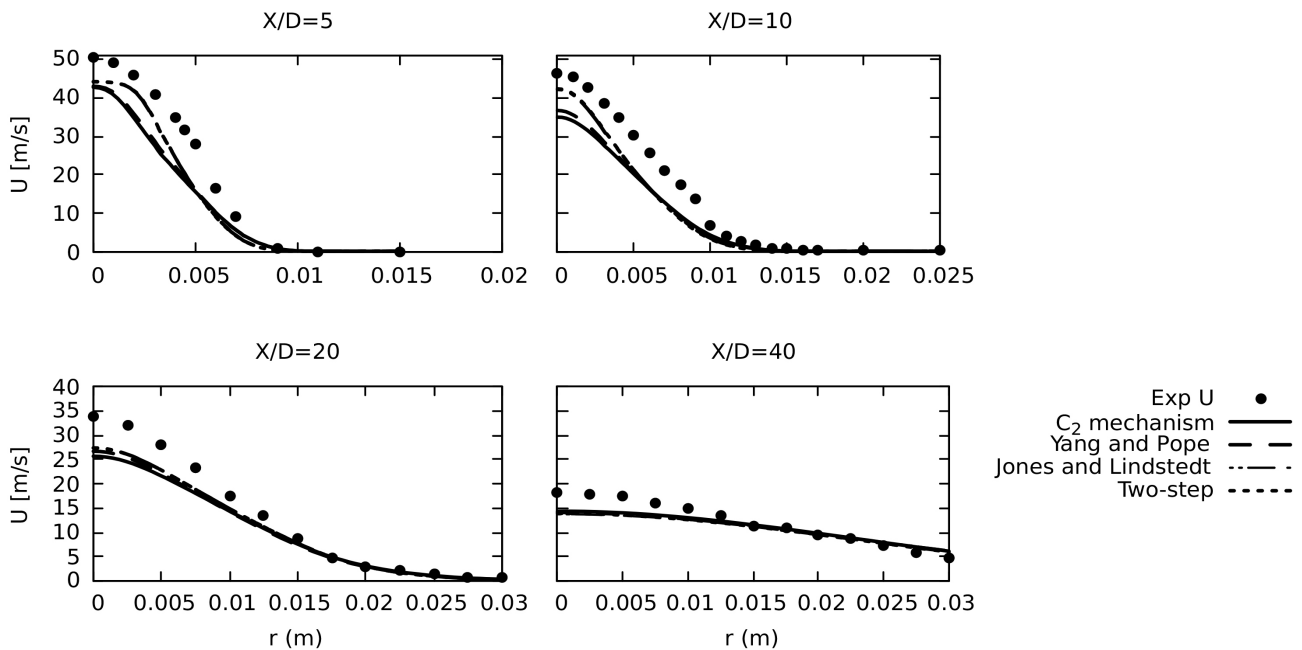


FIGURE 3.18 – Profils radiaux de vitesses pour différents mécanismes appliqués à la DLR-A ($X/D = 5, 10, 20$ et 40).

La Figure 3.18, montre l'influence du schéma cinétique sur la distribution radiale de la vitesse axiale moyennée dans le temps, sur quatre positions ($X/D=5, 10, 20, 40$). Tel qu'observé, les valeurs expérimentales des vitesses sont presque partout, plus élevées que celles obtenues par simulations. Pour les positions radiales plus proches du jet à combustible ($X/D=5$ et 10), les vitesses calculées à l'aide du mécanisme global et du mécanisme semi-global se rapprochent le mieux des mesures expérimentales pour des rayons $0 < r \leq 0.005$. À ces mêmes positions, autour des valeurs de $r > 0.005$, toutes les vitesses coïncident. Aux positions $X/D= 20$ et 40 , la coïncidence des vitesses est observée presque tout au long des rayons. Elles sont d'avantages en accord avec les mesures expérimentales, avec une assez bonne estimation observée près de la couche de cisaillement, autour de $r > 0.005$ sur les deux dernières positions observées ($X/D= 20$ et 40). Ceci démontre une assez bonne estimation de l'amélioration du mélange près de la couche de cisaillement pour les positions $X/D=20$ et

40 et une sous-estimation du mélange aux positions $X/D=5$ et 10. Au fur et à mesure que l'on descend en aval de la position axiale de $X/D = 30$, le mélange de combustible et de comburant est amélioré et la vitesse dans la région de température élevée est mieux estimée. La meilleure estimation des vitesses radiales présentées est observée autour de la position $X/D = 40$.

Dans les Figures (3.19-3.24) les résultats des simulations numériques sont présentés et comparés aux données expérimentales. Une étude expérimentale sur la température et les fractions massiques des différentes espèces a été réalisée par Bergmann et al [2]. Elle révèle que les incertitudes sont estimées inférieures à 5% pour la température et inférieures à 10% pour toutes les fractions massiques d'espèces, sauf pour le CO, où l'erreur peut atteindre 30 à 50% en raison des faibles concentrations dans la flamme. Dans la présentation des résultats les bars d'erreurs sont tracées à l'aide des valeurs de fluctuation données par la RMS (Root Means Square).

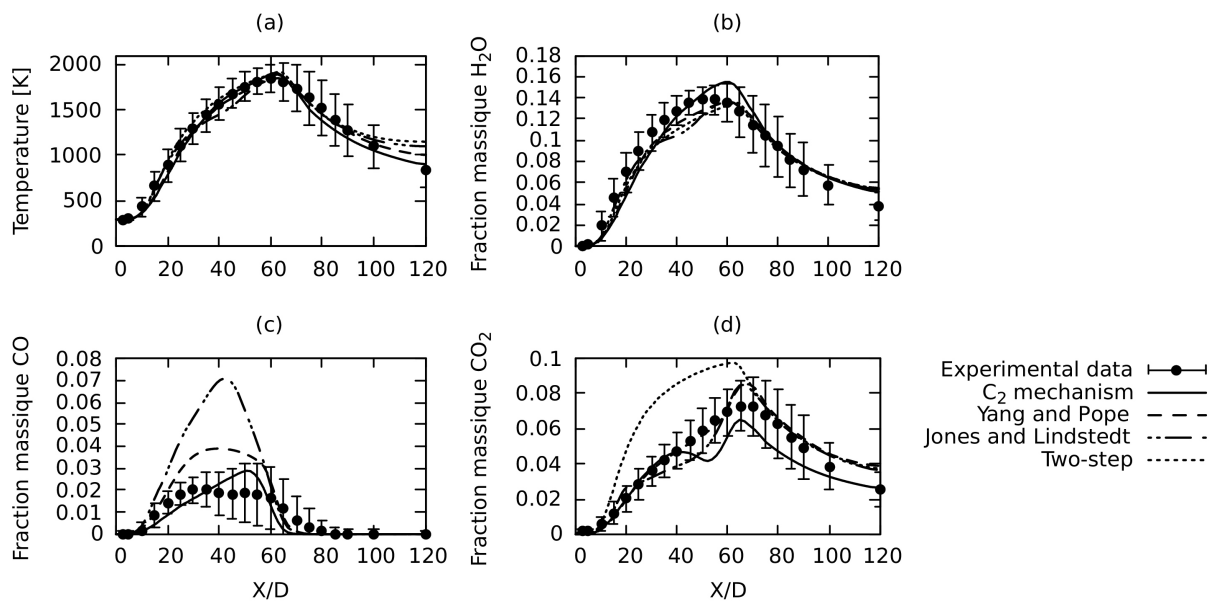


FIGURE 3.19 – Distributions axiales de la température moyenne et de la fraction massique moyenne de H_2O , CO_2 et CO obtenues avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme de C_2 (21 espèces et 51 réactions ; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions ; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions ; sept espèces et quatre réactions ; ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions ; ligne pointillée) en comparaison avec les données expérimentales (barre d'erreur avec symbole de cercle plein).

En observant les profils axiaux de la figure 3.19, les prédictions des températures moyennes et des fractions massiques concordent de façon générale avec les mesures expérimentales. Cependant, quelques discordances sont observées en fonction du mécanisme utilisé. Le mécanisme squelettique dérivé du GRI 3.0, permet une bonne représentation de l'interaction chimie-turbulence, lorsqu'on observe suivant le profil axial. La figure.3.19.(a) donne les résultats des profils axiaux des températures. Ils ne diffèrent pas beaucoup les uns des autres, ce qui indique que les températures sont décrites de manière presque similaire par ces schémas cinétiques. En effet, les calculs prédisent des températures maximales de l'ordre de $1910K$ pour schéma cinétique compacté, à la position $X/D = 62$. Elles sont de l'ordre de $1847K$ et $1888K$ pour le mécanisme à 41 étapes et le mécanisme à 8 étapes respectivement à la position $X/D = 62$ et de l'ordre de $1915K$ pour le schéma chimique à 2 étapes globales et à la position $X/D = 61$. Alors que, la température maximale mesurée par l'expérimental est de l'ordre de $1842K$ et se situe à $X/D = 60$. Les différences entre ces températures maximales par rapport à l'expérimentale sont de $68K$, $5K$, $46K$ et $73K$ respectivement. En ce qui concerne le H_2O (Fig.3.19.(b)), tous les mécanismes conduisent à des résultats presque identiques avec une légère sur-estimation du mécanisme compact C_2 . Cependant, comme le montre la figure des profils axiaux

pour la fraction massique de CO_2 (Fig.3.19.(c)) le pic donné par l'équation de combustion à 2 étapes est très surestimé tandis que celle donnée par le mécanisme compacté est quelque peu sous-estimé par rapport aux valeurs expérimentales bien qu'il reste contenu dans la barre d'incertitude. La fraction massique du CO quant à elle, n'existe pas pour le mécanisme global, ce qui expliquerait une très forte sur-estimation du CO_2 produit par ce dernier. Elle est pas ailleurs légèrement sur estimée pour le mécanisme de Yang et Pope [83] et encore plus pour celui de Jones et Lindstedt [175]. La fraction massique de CO calculé par le mécanisme compacté est celle qui présente une meilleur estimation. Ces résultats révèlent que les mécanismes de type C_2 prédisent le mieux l'espèce CO que celles du type C_1 .

Les profils radiaux sont présentés pour les positions ($X/D=5, 10, 20, 40$). Les profils radiaux de la température sont regroupés à la Figure 3.20. De $X/D = 5$ à $X/D = 40$, les températures prédites, montrent un très bon accord avec les mesures expérimentales. Les largeurs et pics des profils sont bien calculés, dans toutes les régions et positions de la flamme. En plus des mécanismes utilisés, le modèle PaSR se révèle être un modèle adéquat pour prédire correctement la flamme étudiée. Ce pendant, nous pouvons noter que les pics de température donnés par les profils radiaux sont calculés plus correctement, à la position radiale proche de l'entrée du brûleur, $X/D = 5$. Il convient toutefois de noter également que des meilleures estimations numériques sont faites par le mécanisme compact à 51 étapes de réactions. Ce mécanisme a surtout l'avantage de prédire l'espèce CO et le radical OH, mieux que les autres mécanismes.

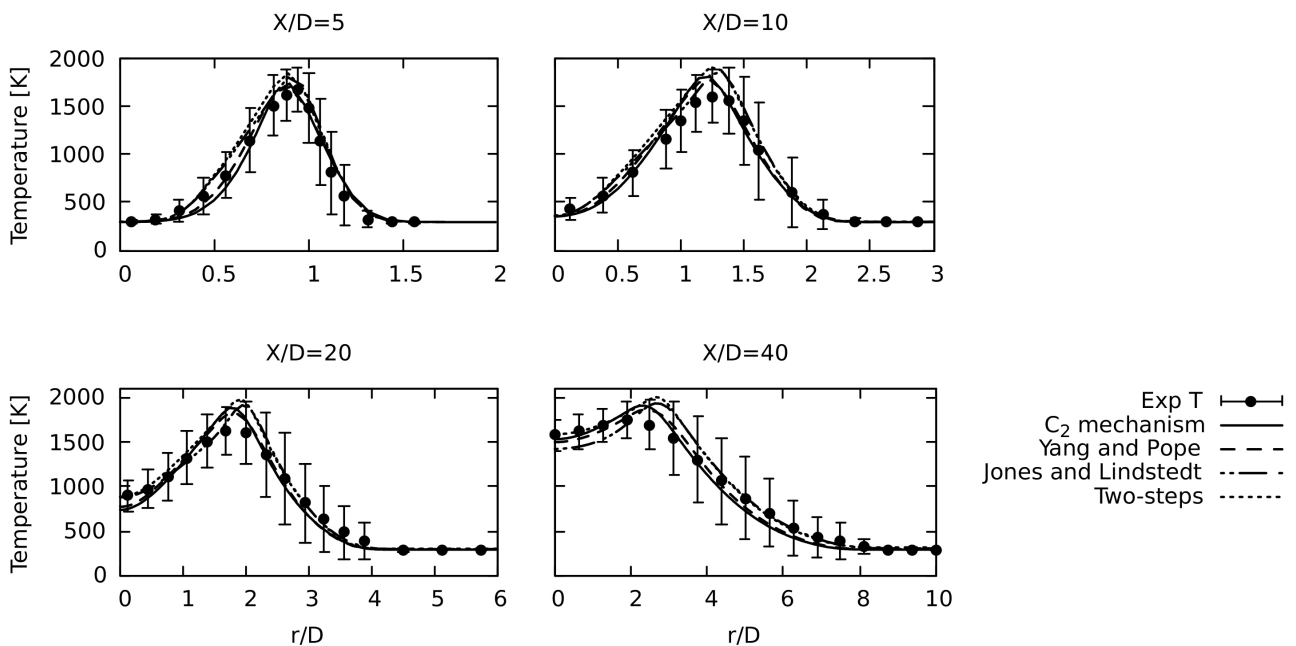


FIGURE 3.20 – Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) de la température moyenne obtenues avec les quatre mécanismes chimiques ci-dessus mentionnés

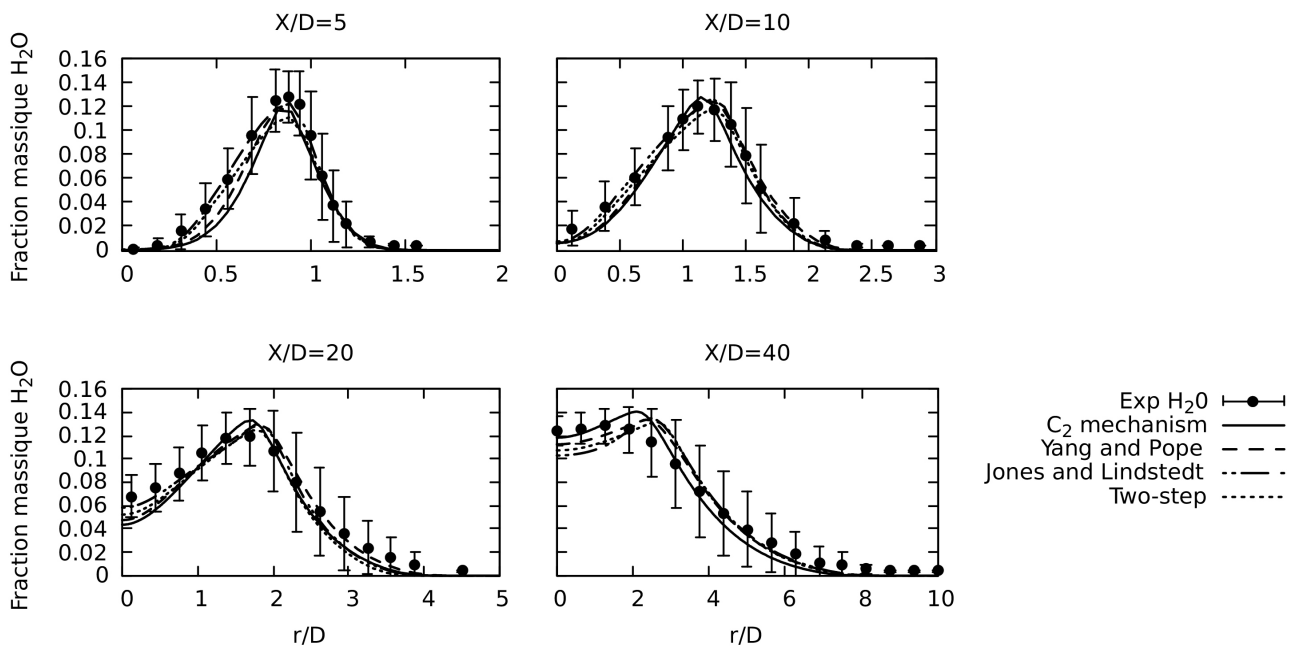


FIGURE 3.21 – Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) du H_2O obtenues avec les quatre mécanismes chimiques ci-dessus mentionnés.

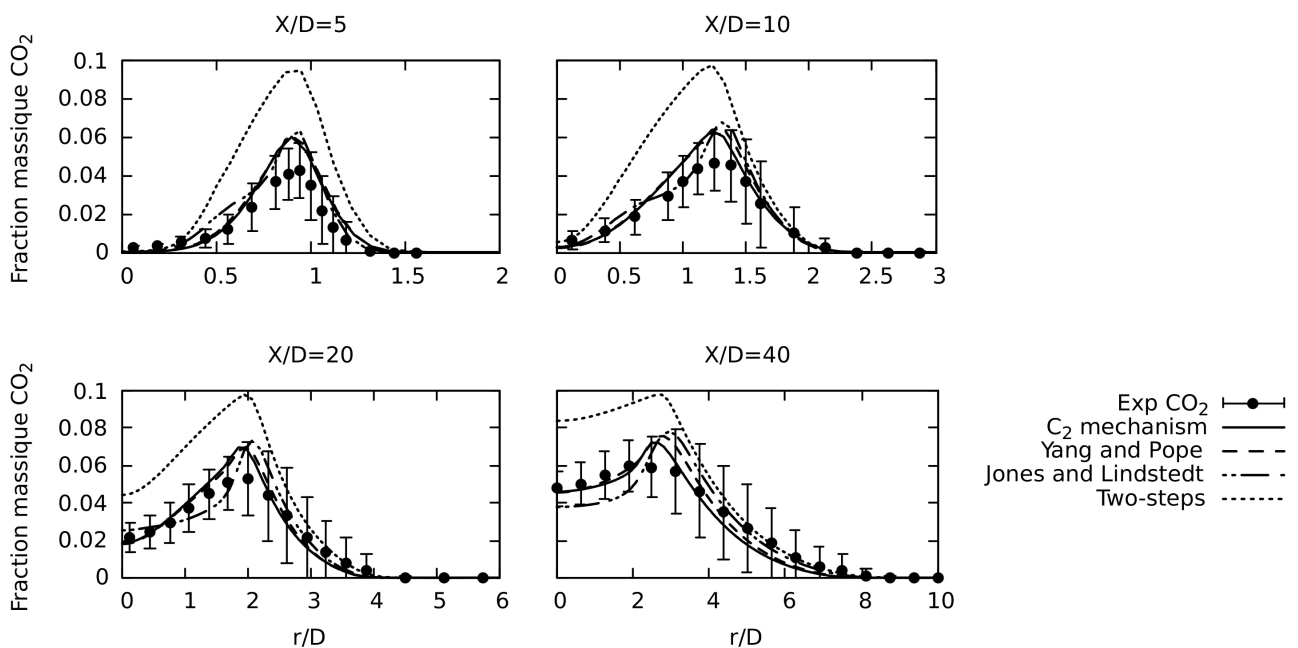


FIGURE 3.22 – Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) de CO_2 obtenues avec les quatre mécanismes chimiques ci-dessus mentionnés.

Les distributions radiales des fractions massiques de H_2O , CO_2 , CO et OH sont également illustrées sur les Figures 3.21 à 3.24. Un bon accord entre les calculs et les mesures est globalement observé. Les quatre mécanismes reproduisent tous la fraction massique moyenne de H_2O en restant dans les limites d'incertitudes données par les fluctuation RMS. Le schéma cinétique compact, le schéma cinétique squelettique de Yang et Pope et le schéma de Jones et Lindstedt donnent une bonne prédiction de la fraction massique de CO_2 . Le mécanisme globale quant à lui donne une très forte surestimation du CO_2 , ceci dû au fait qu'il ne prévoit pas la production du CO . Une réaction de type $CO_2 + C \rightarrow 2CO$, donnerait une meilleur estimation de CO_2 , puisqu'une partie aura été transformée sous la forme de CO . Nous pouvons encore observé que parmi les trois mécanismes donnant lieu de la prédiction de CO , le mécanisme compact donne une meilleur estimation. Ceci

est dû aux espèces "C₂" de ce mécanisme, car les mécanismes de type C₂ prédisent raisonnablement le CO, par rapport à ceux de type C₁ de Yang et Pope [83].

Dans le but d'évaluer l'influence du mécanisme sur la production de la chaleur, la figure 3.25, présente l'évolution radiale aux quatre positions données, du débit calorifique, calculé à partir du taux de consommation du combustible. À la position $X/D = 5$, tout comme pour la température, la prédiction du débit calorifique semble être identique tant avec le mécanisme squelettique qu'avec les mécanismes globaux. On observe une légère sous-estimation avec le mécanisme de Yang et pope, par rapport aux trois autres. Pourtant, dans les trois autres positions radiales, les mécanismes globaux surestiment un peu plus la prédiction de "dQ", avec les distributions radiales presque identiques. De même, les deux mécanismes squelettiques donnent entre eux les courbes ayant les pics très proches, presque de mêmes formes et de mêmes largeurs.

La figure 3.25 montre une comparaison de la distribution axiale prédite du taux de production de chaleur calculée à partir du taux de consommation de combustible, telle qu'obtenue avec les quatre mécanismes de réaction. Les profils de dégagement de chaleur prédits obtenus avec les mécanismes squelettiques C₁ et C₂ montrent deux zones de dégagement de chaleur, à savoir les zones exothermiques primaire et secondaire. De plus, l'emplacement du taux de dégagement de chaleur maximal se situe autour de la position axiale $X/D = 60$, ce qui est cohérent avec l'emplacement de la température maximale.

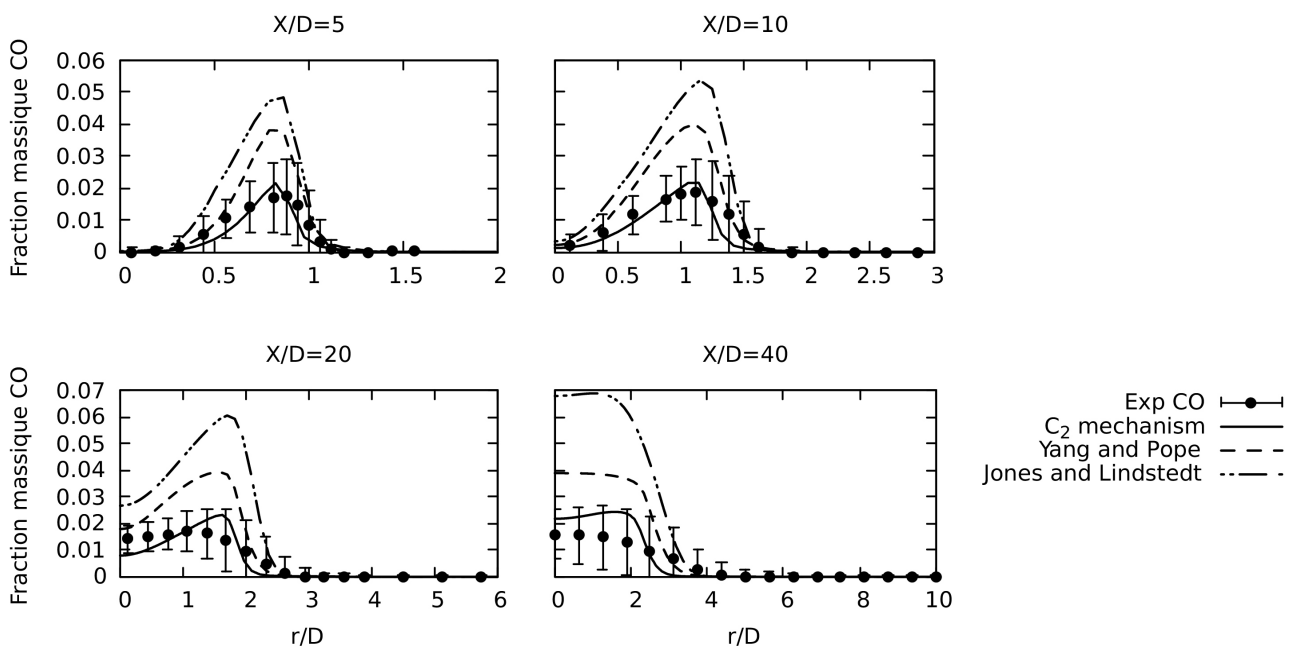


FIGURE 3.23 – Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) du CO₂ avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme de C₂ (21 espèces et 51 réactions; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions; sept espèces et quatre réactions; ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions; ligne pointillée) en comparaison avec les données expérimentales (barre d'erreur, avec symbole de cercle plein).

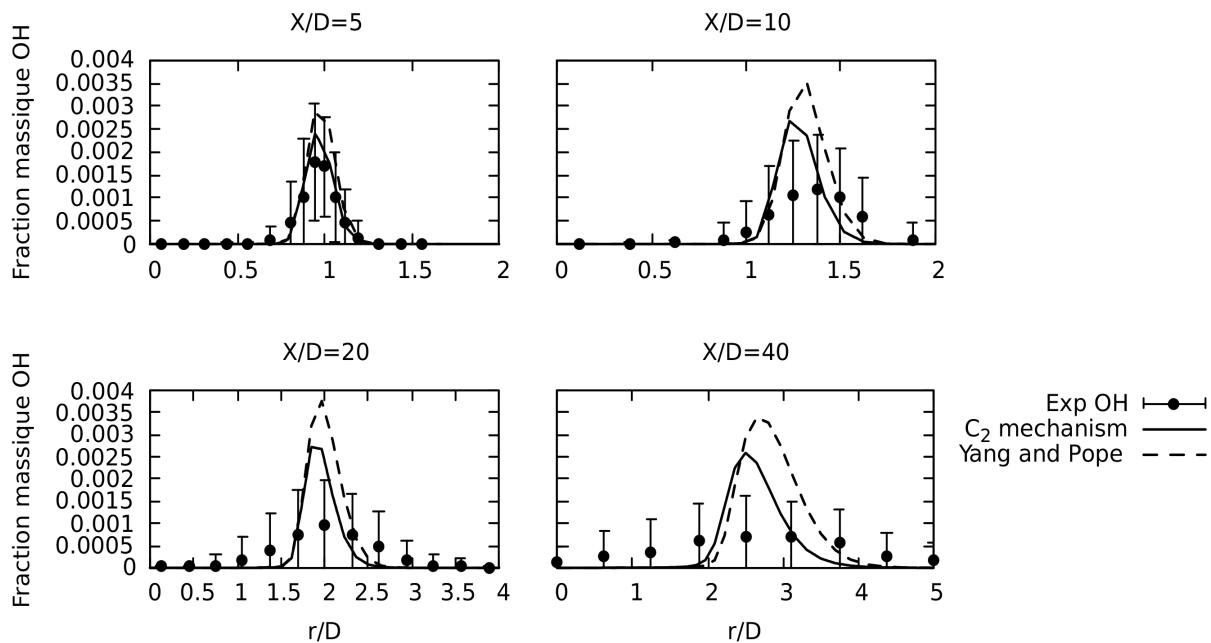


FIGURE 3.24 – Distributions radiales ($X/D=5, 10, 20$ et 40) du OH obtenues avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme de C_2 (21 espèces et 51 réactions; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions; sept espèces et quatre réactions; ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions; ligne pointillée) en comparaison avec les données expérimentales (barre d'erreur, avec symbole de cercle plein).

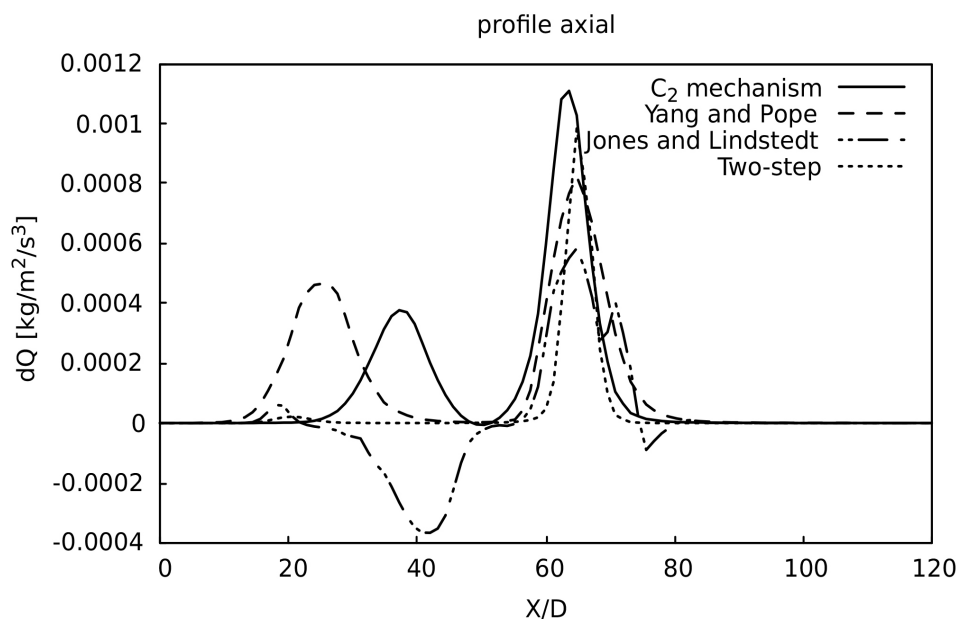


FIGURE 3.25 – Profil axial du taux de production de chaleur tel qu'obtenu avec les quatre mécanismes chimiques, c'est-à-dire le mécanisme C_2 (21 espèces et 51 réactions; ligne continue), le mécanisme de Yang et Pope (16 espèces et 41 réactions; ligne pointillée), le mécanisme de Jones Lindstedt (sept espèces et quatre réactions; point-point-ligne pointillée), et le mécanisme global en deux étapes (six espèces et deux réactions; ligne pointillée).

En somme, ces résultats révèlent que le mécanisme compact obtenu par la méthode multi-étape est très adéquat pour optimiser et simuler avec précision la combustion dans les configurations de type jet simple. Bien qu'un peu plus coûteux en temps de calcul que les trois autres mécanismes, il donne une bonne estimation sur les quantités simulées et permettrait également de gagner en temps de calcul par rapport au mécanisme GRI 3.0 dont il dérive. La dimension C_2 de ce mécanisme améliore les simulations par rapport aux mécanismes

semi-squelettiques ou réduits comme celle de yang et Pope. Cette amélioration peut s'observer sur les prédictions des espèces tels le CO et le OH, et aussi sur les meilleures estimations des pics et les largeurs des courbes. Nous constatons aussi qu'il est possible de combiner les deux équations globales des deux espèces mis en jeu pour la composition du combustible utilisé, pour flamme étudiée et faire des prédictions quelque peu en accord avec l'expérimental. Mise à part le fait qu'elle ne donne pas d'informations sur les espèces et étapes intermédiaires de la réaction, elle permet néanmoins de gagner en temps de calcul, en donnant une idée sur les paramètres physico-chimiques des variables observées. Elle donne également une assez bonne estimation de l'évolution de la température et de la fraction massique du H_2O .

Étude de l'influence des modèles de turbulence

Dans cette section, quatre modèles de turbulence, à savoir, le modèle standard $k-\varepsilon$ (STD), le modèle RNG $k-\varepsilon$, le modèle réalisable $k-\varepsilon$ (RKE) et le $k-\omega$ SST sont considérés afin de prédire le champ d'écoulement et d'évaluer leurs effets sur les résultats de simulation de flamme DLR-A obtenus avec le mécanisme squelettique C_2 .

Ces quatre modèles de turbulence RANS susmentionnés sont utilisés dans nos simulations car ils permettent des temps de calcul réduits par rapport aux modèles LES ou DNS. La figure 3.26 présente les prédictions des profils axiaux de température et de fraction massique H_2O , CO_2 et CO en utilisant le modèle de combustion PaSR en faisant varier les modèles de turbulence (STD, RKE, RNG et SST respectivement).

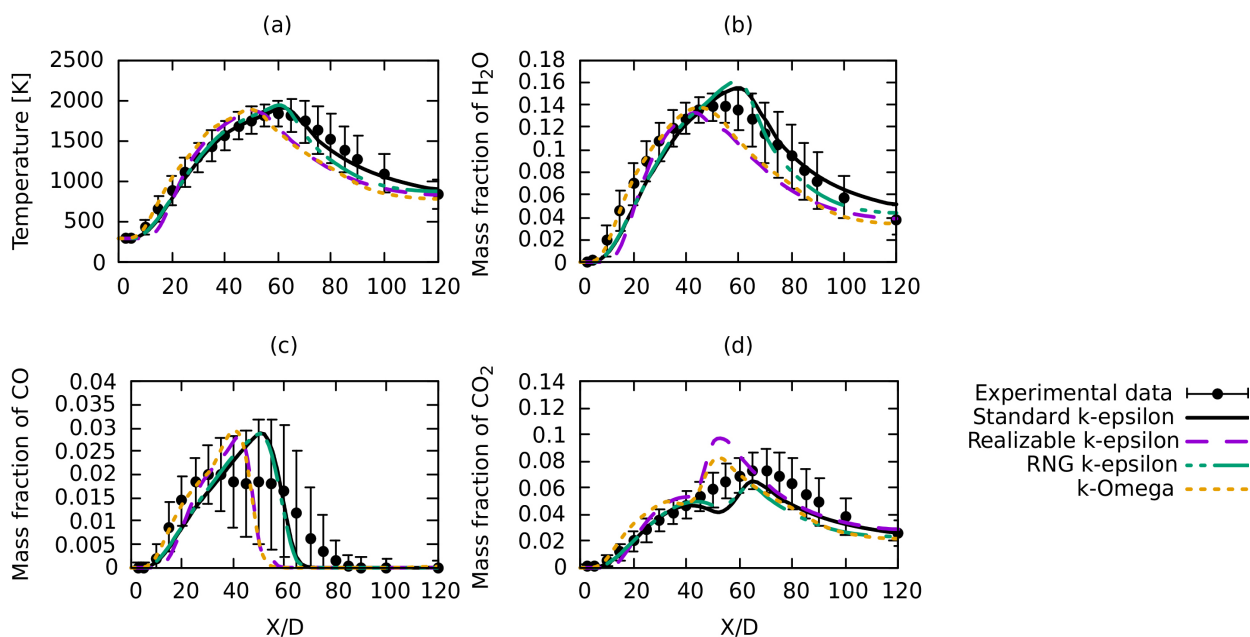


FIGURE 3.26 – Distributions axiales de la température moyenne et de la fraction massique moyenne de H_2O , CO_2 et CO obtenues avec les quatre modèles de turbulence : $k-\varepsilon$ standard (ligne pleine), $k-\varepsilon$ réalisable (ligne pointillée), $k-\varepsilon$ RNG (ligne pointillée-pointillée) et $k-\omega$ SST (ligne pointillée) en comparaison avec les mesures (barre d'erreur avec symbole de cercle plein).

Ces prédictions sont généralement en conformité avec les mesures le long de l'axe central du brûleur. Les prédictions obtenues avec les modèles STD et RNG sont similaires et présentent des résultats plus proches des mesures que les autres. L'évolution des quantités résultant de la combustion (température et fractions massiques) est fortement dépendante du mélange dans un écoulement réactif et donc du modèle de turbulence choisi. Ceci explique les différences observées. Cette disparité pourrait également s'expliquer par le fait que l'axe central du brûleur constitue la zone intérieure de la flamme. De plus, le modèle STD est plus adapté

aux zones internes de la flamme et aux écoulements totalement turbulents sans séparations, que le modèle SST qui convient aux zones internes de la flamme et particulièrement à proximité des parois et des couches de cisaillement [165]. En général, les prévisions de température (RNG, RKE et SST), H_2O et CO_2 , sont surestimées aux positions inférieures à $X/D = 60$ puis sous-estimées aux positions supérieures à $X/D = 60$ par rapport au modèle STD.

La figure 3.27 présente une comparaison entre les distributions de température radiale prédites et les mesures expérimentales. On peut voir sur cette figure que les prédictions sont en bonne concordance avec les mesures, surtout lorsque l'incertitude expérimentale est prise en compte. La longueur hydrodynamique pour l'écoulement turbulent, caractérisant la zone d'une forte dynamique turbulente peut être approximée par [182] :

$$L_{h,turbulent} = 1.359 D Re_D^{1/4}. \quad (3.2)$$

En considérant le diamètre et le nombre de Reynolds à l'entrée du carburant, on a : $X_T = L_{h,turbulent} \approx 0.12$ donc, $X_T/D = 15$. Aux positions $X/D = 5, 40$ respectivement avant et après X_T/D , on observe que tous les modèles de turbulence reproduisent assez bien les mesures expérimentales dans l'ensemble en différentes régions du champ d'écoulement. Ceci pourrait s'expliquer d'une part par la non-présence de zones de recirculation souvent difficilement reproductibles par certains modèles de turbulence et d'autre part parce que la flamme est un jet simple et a un nombre de Reynolds modéré.

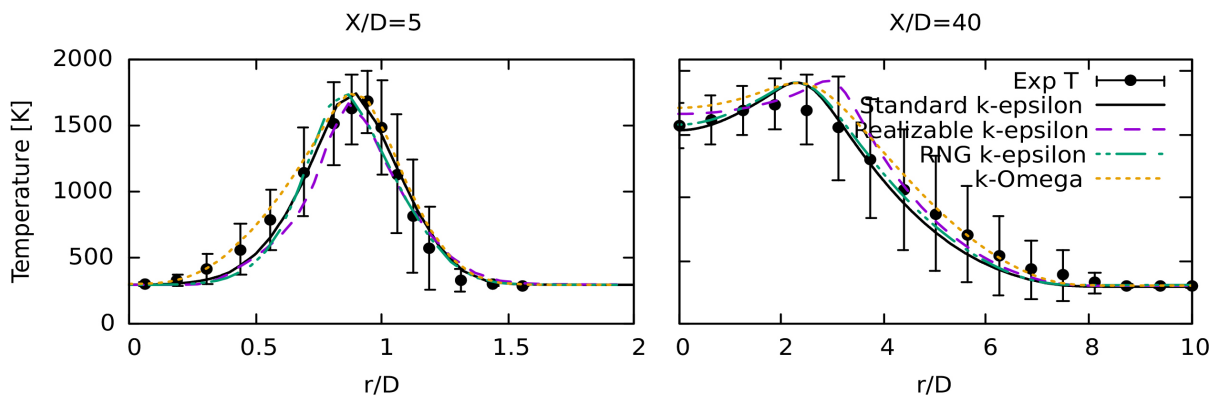


FIGURE 3.27 – Distributions radiales de la température moyenne à deux positions X/D différentes, obtenues avec les quatre modèles de turbulence : ci-dessus mentionnés, en comparaison avec les mesures (barre d'erreur avec symbole de cercle plein).

Les résultats révèlent donc que les prédictions obtenues avec les modèles standard $k-\epsilon$ (STD) et RNG $k-\epsilon$ sont en très bon accord avec les données expérimentales. Ainsi, pour une flamme jet simple avec un nombre de Reynolds modérément élevé comme la flamme DLR-A, le k -epsilon standard peut modéliser la turbulence avec une très bonne précision.

3.2.2 La Flamme "OXYFLAM-2 A" de l'IFRE

Dans ce cas également, le domaine de calcul a été réduit à un problème 2D à symétrie axiale. Pour d'avantage valider la méthode de réduction de mécanismes précédemment utilisée, cette configuration expérimentale a été retenue pour appliquer le mécanisme de Bomba [47].

L'effet des réactions chimiques et de la turbulence d'écoulement est pris en compte dans le modèle PaSR dans le solveur reactingFoam afin de calculer les vitesses de réaction. Le modèle $P-1$ a été utilisé pour prendre en compte l'effet du transfert de chaleur par rayonnement qui est très considérable dans cette flamme compte tenu de la température très élevée qu'elle dégage. Une simulation RANS avec un modèle de turbulence standard $k-\epsilon$ comme dans le cas précédent a été utilisé.

Tableau 3.2 – Conditions aux limites de la flamme OXYFLAM-2 A

Variable	inletFuel	inletoxidizer	outlet	Walls	frontAndBack
U [m/s]	fV : (105.4 0 0)	fV : (109.7 0 0)	zeroG	zeroG	wedge
T [K]	273.15	273.15	1950	zeroG	wedge
k	$I_{turb} = 0.0368$	$I_{turb} = 0.0402$	zeroG	WallF	wedge
ε	$L_{mix} = 0.00112$	$L_{mix} = 0.00056$	zeroG	WallF	wedge
P [pa]	fv :101325	fv :101325	fv :101325	fv :101325	wedge
X_{CH_4}	86%	0	0	0	wedge
X_{CO_2}	1.79%	ppm <5	33.3%	0	wedge
X_{O_2}	0.21%	99.5%	0	0	wedge
X_{N_2}	4.01%	ppm < 100	0	0	wedge
$X_{C_nH_m}$	7.99%	ppm < 20	0	0	wedge

La composition des gaz d'échappement est estimée à $X_{CO_2} = 0,333$ et $X_{H_2O} = 0,667$ à 1950 K et à pression ambiante.

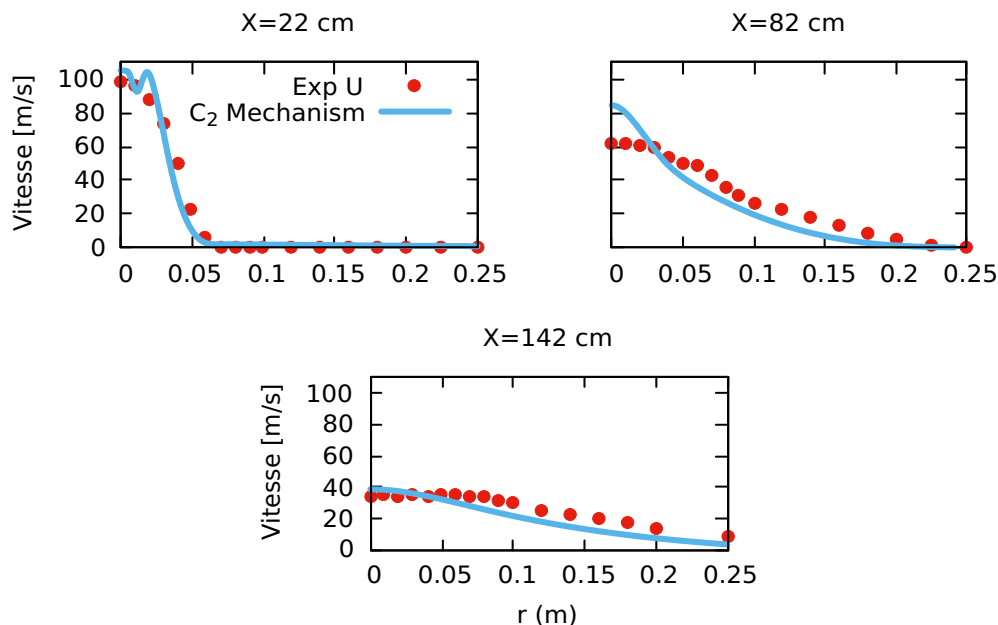


FIGURE 3.28 – Profils radiaux de vitesse aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).

Les figures 3.28-3.33 présentent des profils radiaux de la vitesse moyenne, de la température et des principales espèces. Pour chaque grandeur, trois distances axiales différentes (0,22 m, 0,82 m et 1,42 m) de la sortie du brûleur sont considérées. Une légère surestimation est observée à 0,22 m et un peu plus prononcée à 0,88 m en raison du combustible constitué du méthane pur, dont la densité est inférieure à celle du gaz naturel dans les expériences. Cette différence impliquerait une influence sur le débit massique. Les disparités de la vitesse axiale semblent être négligeables en amont et plus en aval de $x = 0,82$ cm (à 0,22 m et à 1,42 m), où la vitesse est en bon accord avec les expériences ; cette observation a déjà été faite par Wollny *et al.* [13].

La figure 3.29 montre les profils radiaux de température mesurés et prédits aux emplacements à 0,22, 0,82 et 1,42 m du mur avant. Les profils de température prédits concordent assez bien avec les mesures. La différence dans les prévisions de température obtenue avec la modélisation et les mesures expérimentales, est faible,

sauf dans la couche de mélange chaude entre le combustible et le flux d'oxygène aux positions $x = 0,22$ m et $x = 0,82$ m ($r < 0,1$ m). Il est donc observé une plus grande disparité dans les zones hautement réactives. À la position $x = 1,42$ m la valeur axiale de la température semble se rapprocher plus de la valeur expérimentale qu'à d'autres positions. Cela reflète également les observations faites sur les profils de vitesse. La couche de mélange chaude entre le combustible et le flux d'oxygène est une région où les phénomènes de fluctuations dû à la turbulence sont plus accrus vu le nombre de Reynolds assez élevé. Ces phénomènes présentent plus de complexité à la modélisation ; ce qui pourraient expliquer les différences observées.

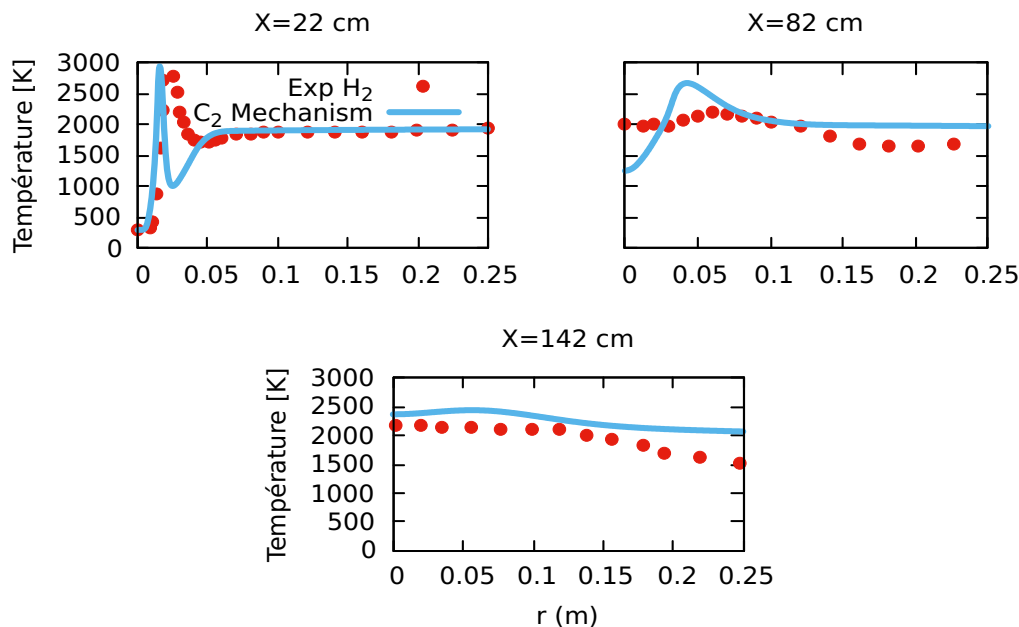


FIGURE 3.29 – Profils radiaux de la température moyenne aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).

Une étude plus rigoureuse de la qualité des prédictions consiste à comparer les concentrations d'espèces mesurées et simulées. Les figures 3.30 à 3.33 montrent les distributions radiales du CH_4 , O_2 , CO_2 et CO obtenues à $x = 0,22, 0,82$ et $1,42$ m du mur avant. Les concentrations en volume molaire de l'espèce CH_4 est en bonne proportion et en accord avec les mesures expérimentales aux positions $x=0,22$ et $1,42$ m. À $x = 1,42$ m, cette concentration est surestimée. Elle montre une mauvaise estimation de la consommation du CH_4 dans cette région. Cela serait dû au phénomène de diffusion entre le combustible et le comburant hautement turbulent qui prévaut dans cette zone. Ce qui explique également une sous-estimation du O_2 à $x = 0,82$ m bien qu'il présente une bonne allure de manière générale. Ici, une légère différence dans les concentrations de O_2 des gaz de combustion sortant de la chambre de combustion a pu être observée, ceci démontre qu'une quantité négligeable de produits de dissociation dus aux imbrûlés soient présentes.

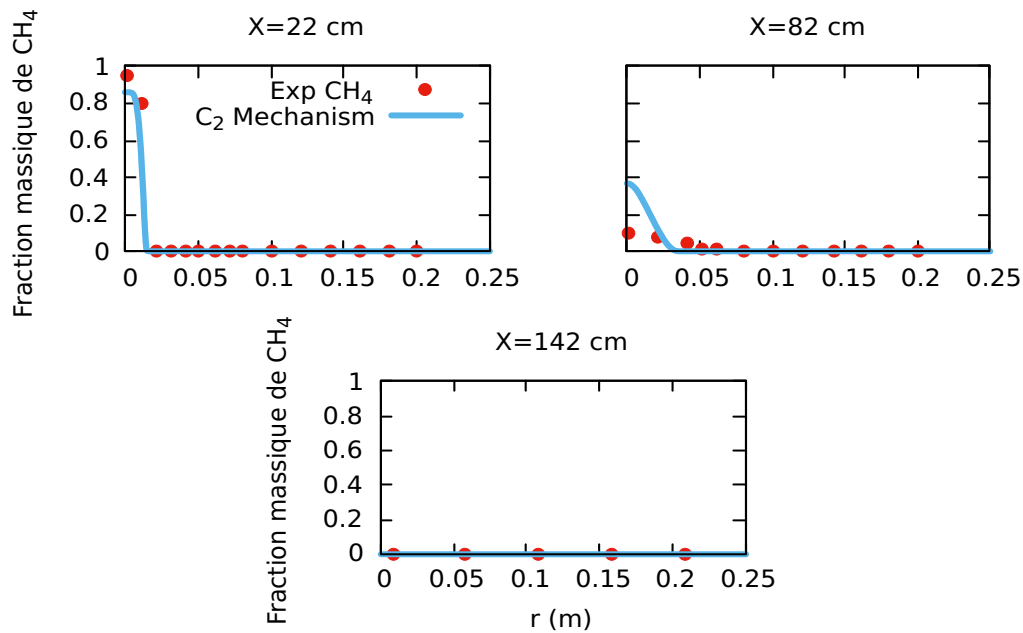


FIGURE 3.30 – Profils radiaux du CH_4 aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).

Dans les prédictions des concentrations de CO_2 , la simulation fournit d'excellents résultats à l'endroit le plus proche du brûleur, soit à $x = 0,22$ m. Plus en aval, la dispersion des mesures rend les résultats plus difficiles à évaluer, mais les prédictions du CO_2 présente pourtant un écart avec la valeur axiale expérimentale dans le four, concorde pourtant avec ceux mesurés dans les gaz de combustion.

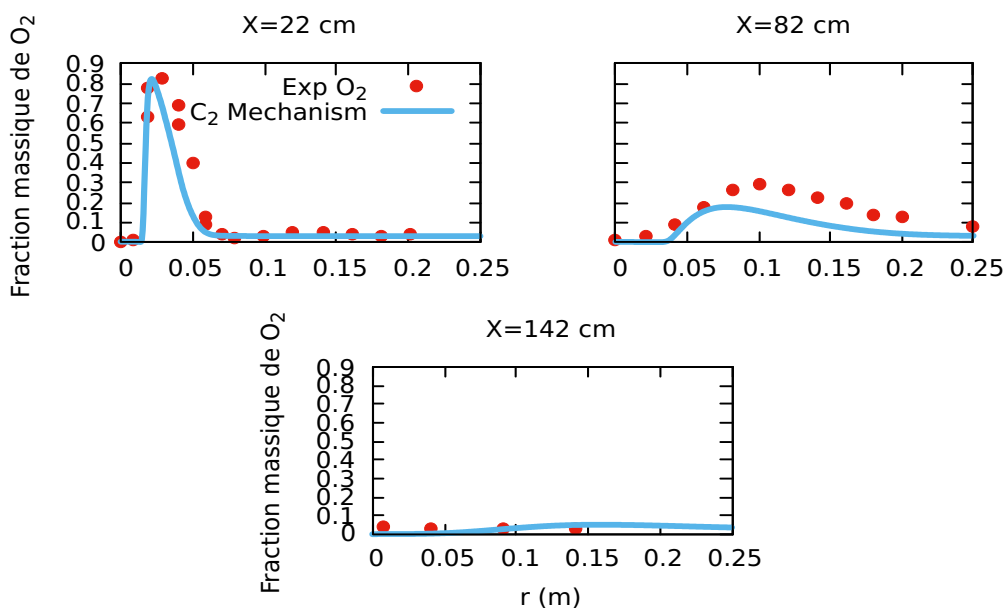


FIGURE 3.31 – Profils radiaux du O_2 aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).

La figure 3.33 montre les profils mesurés et prédits de CO . La qualité des prévisions de CO à $x = 0,22$ m est difficile à juger en raison du profil très raide. Bien que les niveaux des emplacements d'échantillonnage soient en accord raisonnable, il est probable que les niveaux de CO soient considérablement surestimés dans les prévisions. De manière générale, les pics des concentrations prédites sont nettement supérieures à celles mesurées.

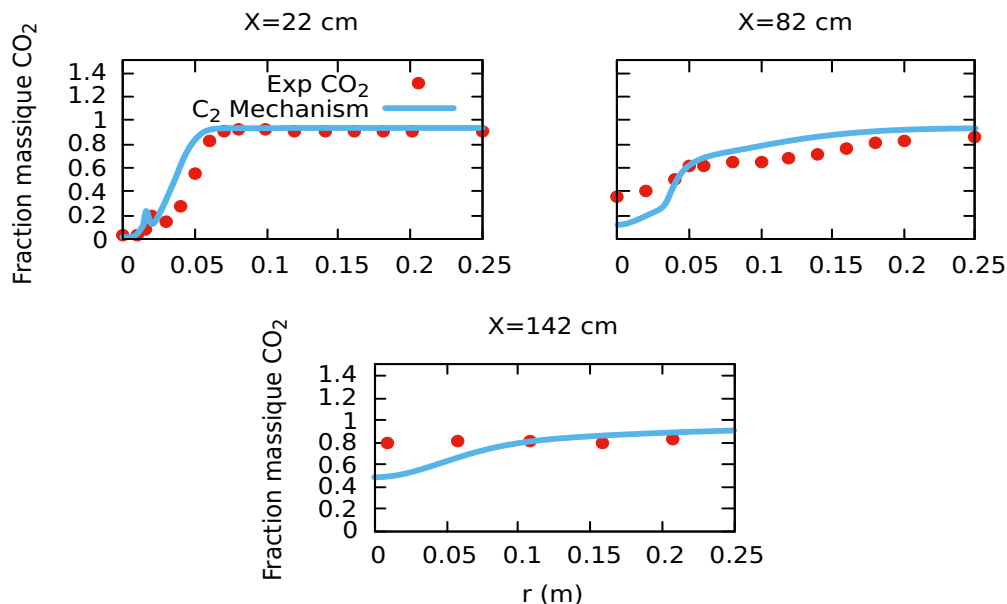


FIGURE 3.32 – Profils radiaux du CO_2 aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).

Le modèle de mécanisme squelettique obtenu par la méthode multi-étape, est potentiellement moins exigeant en termes de temps de calcul que le mécanisme dont il dérive ; car le nombre de réactions du mécanisme réduit est 12% du nombre initial du mécanisme original. Cependant, dans la présente étude, compte tenu la complexité de la configuration, elle s'est avérée fastidieux à modéliser. En conséquence, une étude plus coûteuse en temps de calcul semble être une alternative utile pour une meilleur modélisation pourvu de se procurer des modèles de combustion et de turbulence plus performant et un ordinateur de meilleures caractéristiques.

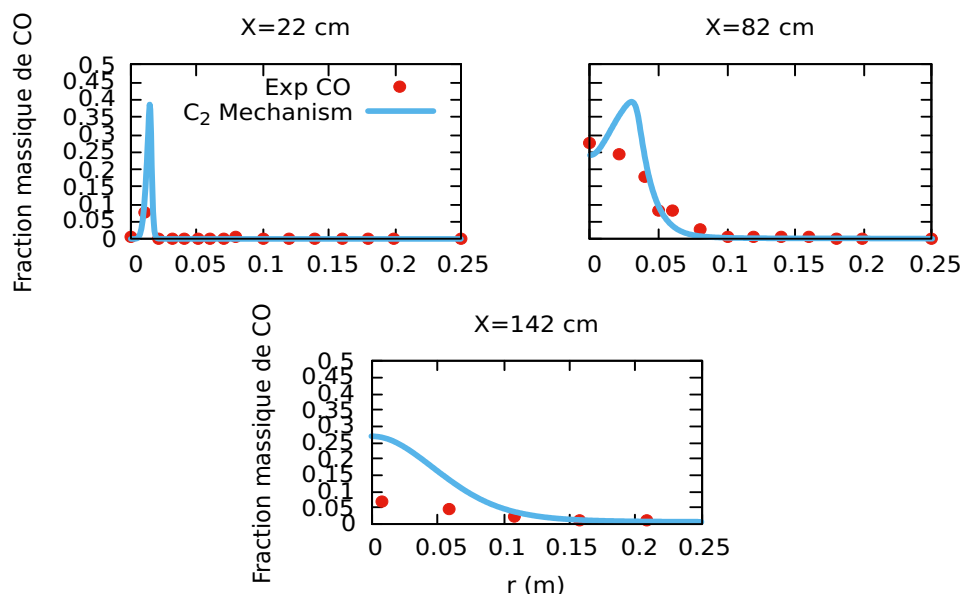


FIGURE 3.33 – Profils radiaux du CO aux positions $x = 22, 82$ et 142 cm de la flamme OXYFLAM-2 A avec un mécanisme C_2 (21 espèces et 39 réactions en ligne continue), comparé à l'expérimental (en symbole de cercle plein).

3.2.3 La Flamme "D" de Sandia

Les conditions aux limites et de symétrie, ainsi que la valeurs d'entrée appliquées à la limite périphérique interne et aux deux faces latérales, sont consignées dans le tableau 3.3.

Tableau 3.3 – Conditions initiales et aux limites de la flamme D

Variable	inletFuel	inletPilot	coFlow	outlet	Walls	frontAndBack
U [m/s]	fV : (49.6 0 0)	fV : (11.4 0 0)	fV : (0.9 0 0)	pIOV	zeroG	wedge
k	$I_{turb} = 0.0458$	$I_{turb} = 0.0628$	$I_{turb} = 0.0471$	zeroG	WallF	wedge
ε	$L_{turb} = 5.04e-4$	$L_{turb} = 7.35e-4$	$L_{turb} = 0.0197$	zeroG	WallF	wedge
P [Pa]	zeroG	zeroG	zeroG	100000	zeroG	wedge
T [K]	fV : 294	fV : 1880	fV : 291	zeroG	zeroG	wedge
Y_{CH_4}	fV : 0.1561	fV : 0	fV : 0	zeroG	zeroG	wedge
Y_{O_2}	fV : 0.1966	fV : 0.054	fV : 0.23	zeroG	zeroG	wedge
Y_{CO_2}	fV : 0	fV : 0.1098	fV : 0	zeroG	zeroG	wedge
Y_{CO}	fV : 0	fV : 4.07e-3	fV : 0	zeroG	zeroG	wedge
Y_{N_2}	fV : 0.6473	fV : 0.7342	fV : 0.77	zeroG	zeroG	wedge
Autres Y_{Pilote}	fV : 0	fV : 0.0979	fV : 0	zeroG	zeroG	wedge

fV=fixedValue, I_{turb} =turbulentIntensityKineticEnergyInlet, L_{turb} =turbulentMixingLengthDissipationRateInlet, pIOV=pressureInletOutletVelocity, zeroG=zeroGradient, WallF=WallFunction.

Application du mécanisme squelettique aux modèles EDC et PaSR

Une autre validation du mécanisme squelettique compact dérivé du GRI 3.0 à l'aide de la méthode multi-étape et taillé selon la configuration et les conditions aux limites de la flamme D. Les analyses des simulations à l'aide d'un maillage de 38700 cellules, sont présentées dans cette sous-section. L'effet du mécanisme sur les prédictions est étudié en comparaison au modèle GRI 3.0 associé aux modèles de combustion PaSR et EDC pour les calculs. L'effet du modèle de combustion (EDC et PaSR) sur les différents mécanismes (squelettiques et détaillé) est étudié. Le tableau 3.4, la variation des temps d'exécution des calculs selon les mécanismes et les modèles de combustion utilisés.

Tableau 3.4 – Temps d'exécution moyens par itération en fonction du modèle de combustion.

Mécanismes chimiques	Espèces	Réactions	Temps d'exécution [s]
GRI3.0-EDC	51	325	1.92
Meca-C ₂ -EDC	20	47	1.1
GRI3.0-PaSR	51	325	1.96
Meca-C ₂ -PaSR	20	47	1.4

Les figures 3.35 à 3.43 montrent les distributions radiales des valeurs moyennes de température et des fractions des espèces majoritaires à plusieurs positions axiales. Pour comparer les différentes méthodes de réductions, les résultats sont obtenus par les simulations RANS ($k - \varepsilon$ standard), les modèles de combustion à chimie non infiniment rapide (EDC et PaSR) qui sont employés sont répertoriés ainsi que la méthode de radiation $P-1$.

Cinq positions axiales sont sélectionnées pour analyser les résultats du profil radial. On peut citer une position d'allumage près de l'entrée du jet : $x/D = 1$; une position où l'extinction partielle est produite est : $x/D = 7,5$, une autre où il existe un phénomène de combustion en position de rallumage : $x/D = 15$, deux qui sont près de la région stœchiométrique : $x/D = 30$ et $x/D = 45$.

Une analyse quantitative peut-être faite à l'aide des contours de températures présentés à la figure 3.34. Les longueurs des flamme sont quasiment du même ordre, sauf quelques différences. Avec le modèle PaSR, la longueur de la flamme entre les mécanismes détaillés et squelettiques présente une plus grande différence qu'avec le modèle EDC. Ceci pourrait expliquer d'une part que le modèle PaSR présente une plus large diffusion et d'autre part qu'il est plus sensible à la réduction de mécanismes que le modèle EDC.

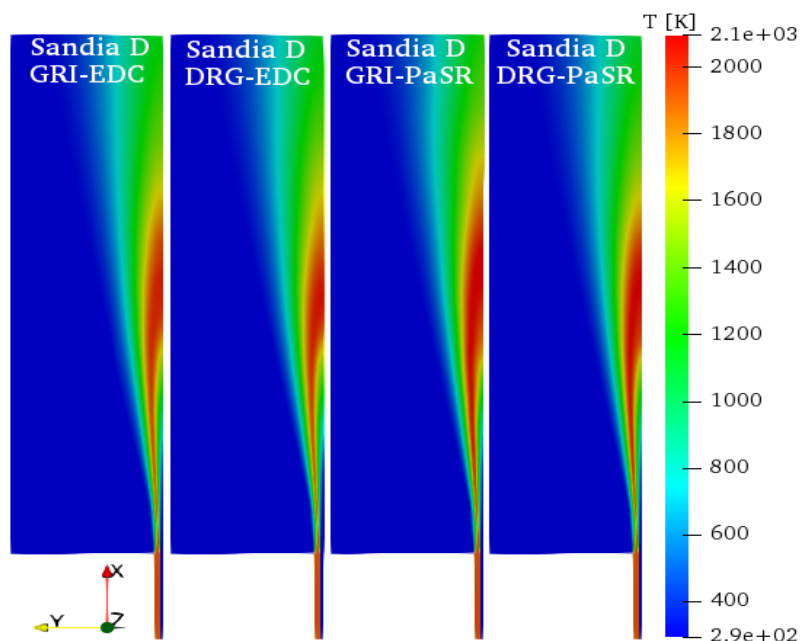


FIGURE 3.34 – Comparaison des contours de température à l'aide des modèles EDC et PaSR, couplés aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique du DRG (GRI-EDC, DRG-EDC, GRI-PaSR et DRG-PaSR).

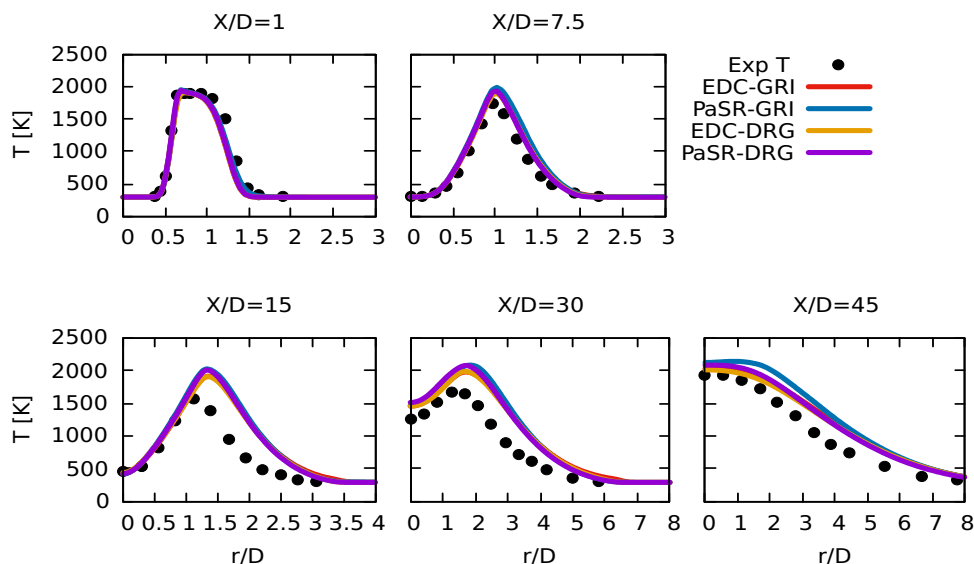


FIGURE 3.35 – Profils radiaux de la température aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplés aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

Les températures prédites par le modèle EDC sont quasiment du même ordre que celles prédites par le modèle PaSR (voir figure 3.35). Cela trouve son sens du le fait que les deux modèles sont à chimie non-infiniment rapide supposant que les espèces chimiques ne réagissent que dès qu'elles sont mélangées, après un temps appelé délais d'ignition. Ils modélisent une faible dégagement de la chaleur et ont donc des températures plus basses que dans les cas des modèles à chimie infiniment rapide, en se rapprochant le mieux de l'expérimental.

Les distributions radiales des températures sont presque de même largeur et de même pic que les mesures expérimentales. Les courbes représentant les températures du mécanisme squelettique ont les mêmes allures que celles du mécanisme détaillé du GRI 3.0 dont il dérive.

Il existe néanmoins de légères discordances entre les simulations et les mesures expérimentales. Cela peut s'observer précisément à partir de la position $x/D = 15$ où les pics des températures calculés sont quelques peu surestimés. Ces différences entre les prédictions et les données mesurées pourraient provenir des simplifications des paramètres de frontière, du modèle de turbulence, de l'interaction turbulence-réaction et du modèle de transfert de chaleur par rayonnement. Par exemple, dans cette étude, une hypothèse de minceur optique a été utilisée pour le traitement des pertes radiatives. Il a été montré [183] que le sous-modèle de rayonnement optiquement mince n'a pas prédit avec précision la fraction radiante pour cette flamme. En se basant sur les caractéristiques spectrales de l'émission radiante et de la transmittance, ils ont trouvé que l'hypothèse d'un rayonnement optiquement mince était inappropriée pour les flammes à jet de CH_4/air partiellement prémélangées. Ainsi, il sera intéressant dans un travail futur de calculer cette flamme avec un autre sous-modèle de rayonnement.

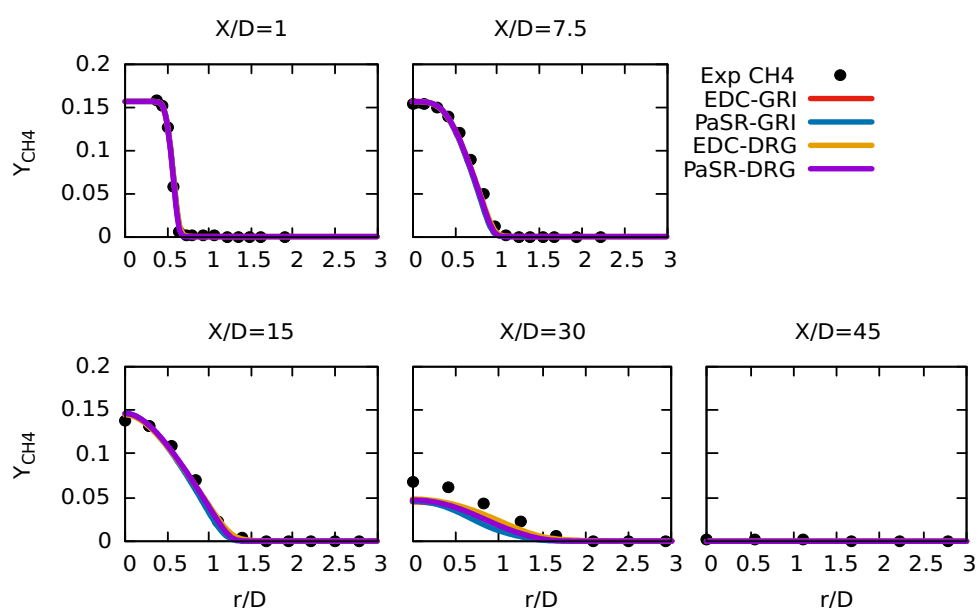


FIGURE 3.36 – Profils radiaux du CH_4 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

Les figures 3.36 à 3.43 révèlent que les espèces moyennes calculées telles que : Y_{CH_4} , Y_{H_2} , $Y_{\text{H}_2\text{O}}$, Y_{CO_2} , Y_{CO} , Y_{O_2} , Y_{N_2} , et Y_{OH} par les approches basées sur l'EDC et le PaSR avec les chimies GRI3.0 et squelettique, ont le même comportement que la température moyenne. Ils suivent presque la même allure et concordent raisonnablement avec les données expérimentales. Quelques déviations sont néanmoins observées à l'instar du Y_{H_2} , Y_{CO} et Y_{OH} dont les courbes des différents modèles ne concordent pas toujours aux positions $x/D = 30$ et $x/D = 45$. La prédiction de OH dans toute simulation de combustion est particulièrement difficile en raison de la forte non-linéarité de l'évolution de cette espèce [183]. Le niveau d'accord affiché par OH est raisonnablement bon, cependant les fractions de masse maximale calculées sont sur-estimées de manière significative par rapport aux données mesurées aux différentes positions axiales.

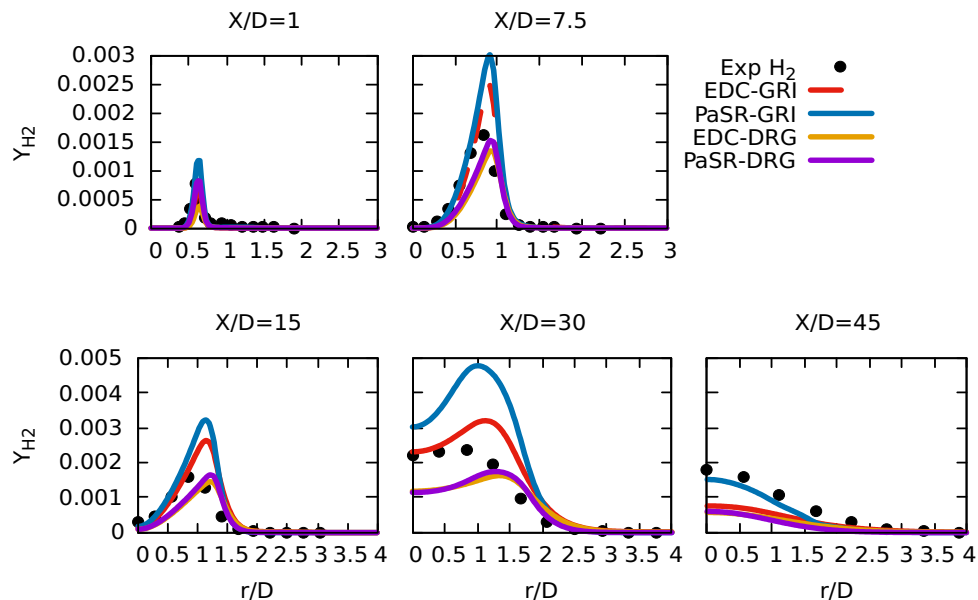


FIGURE 3.37 – Profils radiaux du H_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

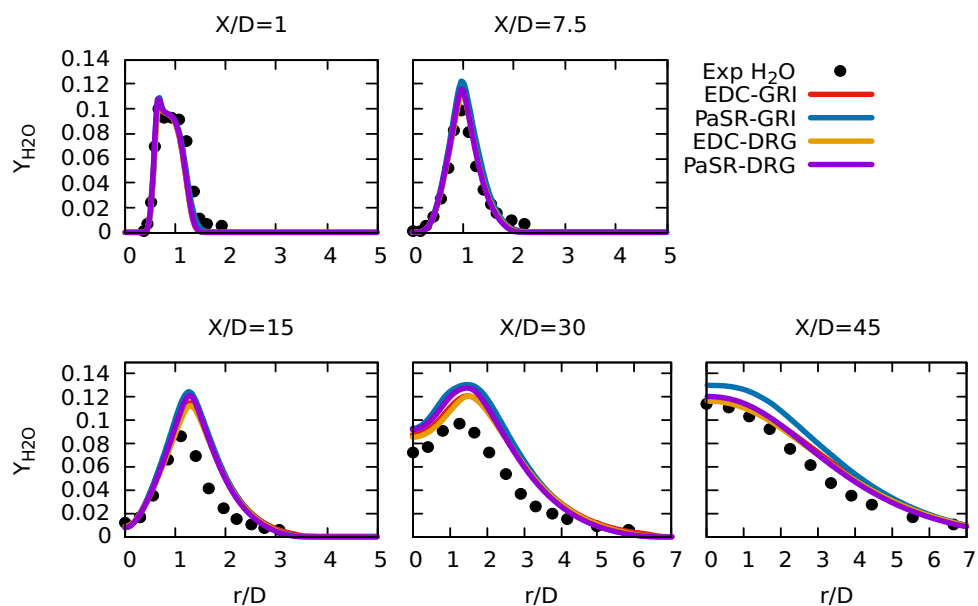


FIGURE 3.38 – Profils radiaux du H_2O aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

De ces résultats des simulations comparés aux données expérimentales de température et d'espèces, il est à noter que le mécanisme réactionnel simplifié testé est capable d'entretenir une flamme stabilisée par une flamme pilote. Notez également que tous les résultats, numériques et expérimentaux, ont été tracés en fonction du rapport r/D , étant r le rayon du jet du combustible et D le diamètre (conformément aux données expérimentales présentées). On peut observer que le mécanisme squelettique a produit des comparaisons acceptables dans quasiment toutes les régions (où l'activité chimique est la plus forte et aussi où elle est faible). Les fractions massiques telles que le Y_{CH_4} , Y_{H_2O} , Y_{CO_2} , Y_{O_2} et Y_{N_2} , sont reproduites de la même façon qu'avec le GRI 3.0. Les fractions massiques des quantités substantielles de CO et H_2 existant en équilibre avec CO_2 et H_2O sont mieux simulées avec le mécanisme squelettique compact du DRG. De cet équilibre on observe que la température de flamme au dessus des valeurs prédites par le mécanisme de réaction due au fait que le CO_2

et le H₂O soient également surestimés. En plus du fait que le gaz brûlé contient des espèces incomplètement oxydées, il est également reconnu que les hydrocarbures typiques brûlent de manière séquentielle, c'est-à-dire que le combustible est partiellement oxydé en CO et H₂.

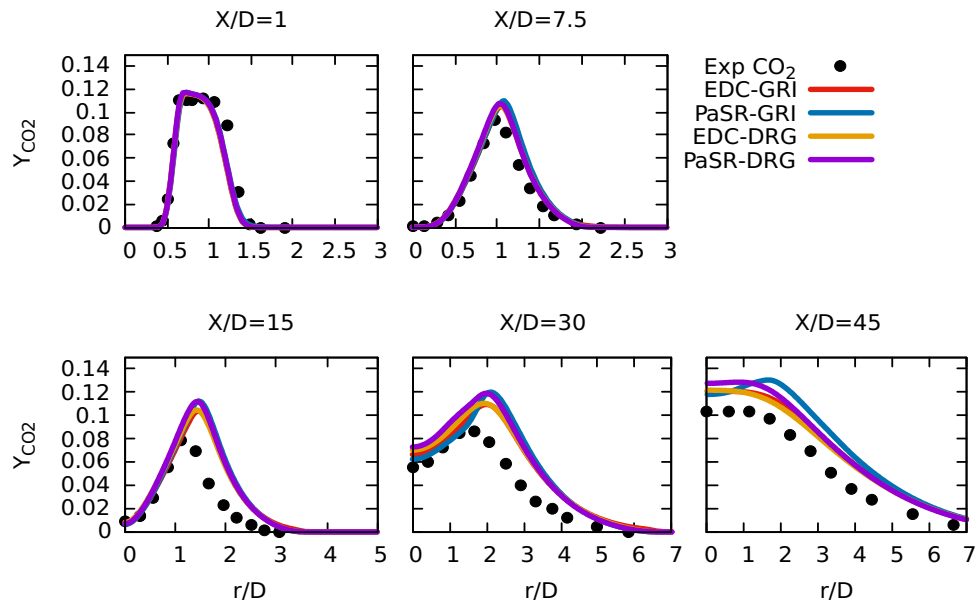


FIGURE 3.39 – Profils radiaux du CO₂ aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

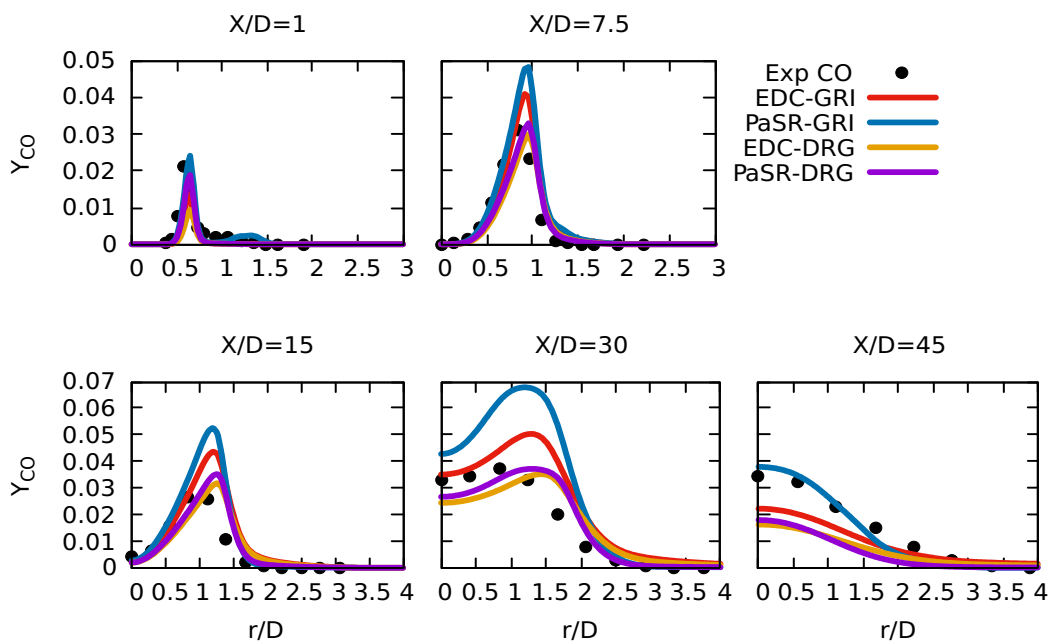


FIGURE 3.40 – Profils radiaux du CO aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C₂ (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

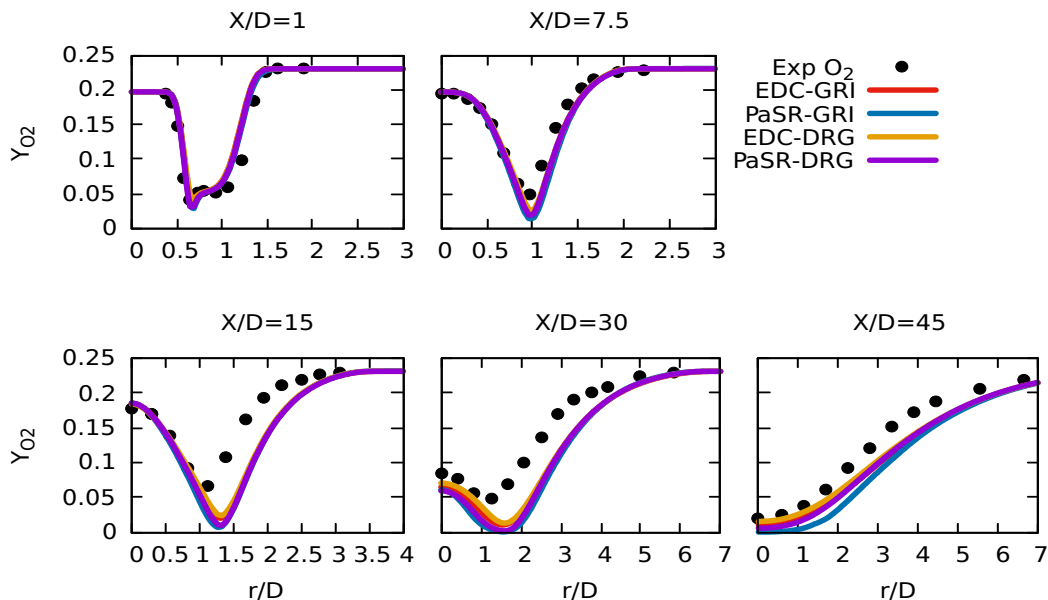


FIGURE 3.41 – Profils radiaux du O_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

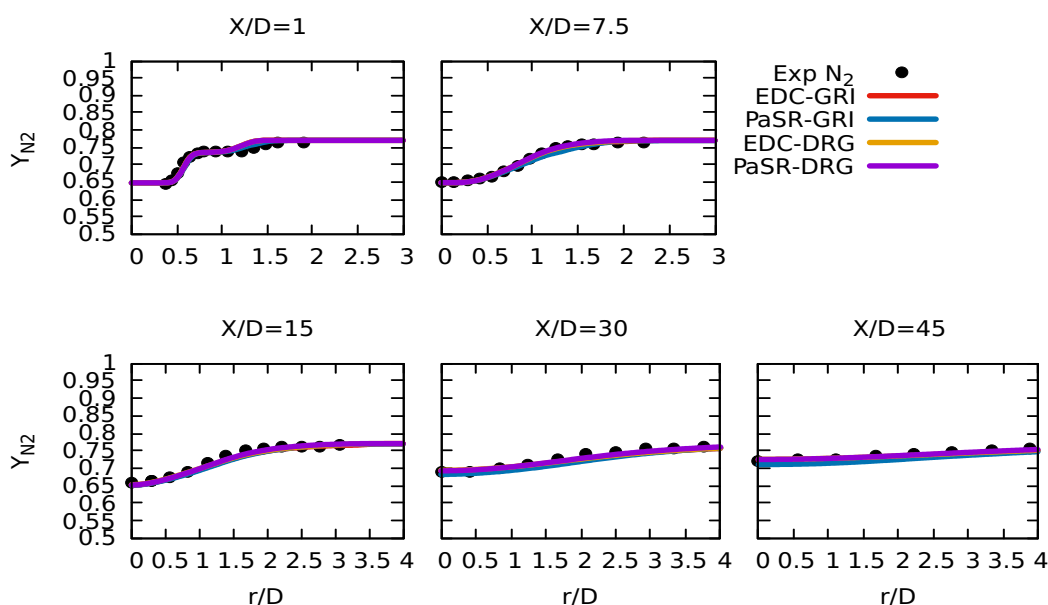


FIGURE 3.42 – Profils radiaux du N_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

Pour tenir compte de cet effet de conversion incomplète des réactifs CH_4 et O_2 en produits CO_2 et H_2O , les réactions d'oxydation du CO doivent donc davantage être explorés dans nos futures mécanismes. L'ajout de l'équilibre $CO-CO_2$ par des réactions du type $CO+OH \leftrightarrow CO_2+H$, et H_2O-H_2 pourront fournir une température de flamme mieux estimée par le mécanisme réduit. Soit-disant, des améliorations supplémentaires dans l'expression des effets dissociés sur la température du gaz brûlé conduiraient à des améliorations supplémentaires. Les comparaisons des résultats des simulations entre le mécanisme squelettique, ainsi que le GRI 3.0 avec des expériences n'ont montré aucune différence majeure lorsque la température augmente. Une amélioration de la modélisation du dégagement de chaleur est également nécessaire, pour bonne estimation des températures des gaz brûlés lorsqu'on évolue vers les parois. Le modèle de cinétique chimique squelettique du DRG multi-étape en comparaison avec le mécanisme détaillé GRI 3.0, ont été appliquées avec succès à la

simulation numérique de la combustion avec la configuration de la flamme D mise en œuvre dans le code CFD OpenFOAM. Ces différents mécanismes cinétiques ont été validés avec les modèles EDC et PaSR présentés dans ce travail.

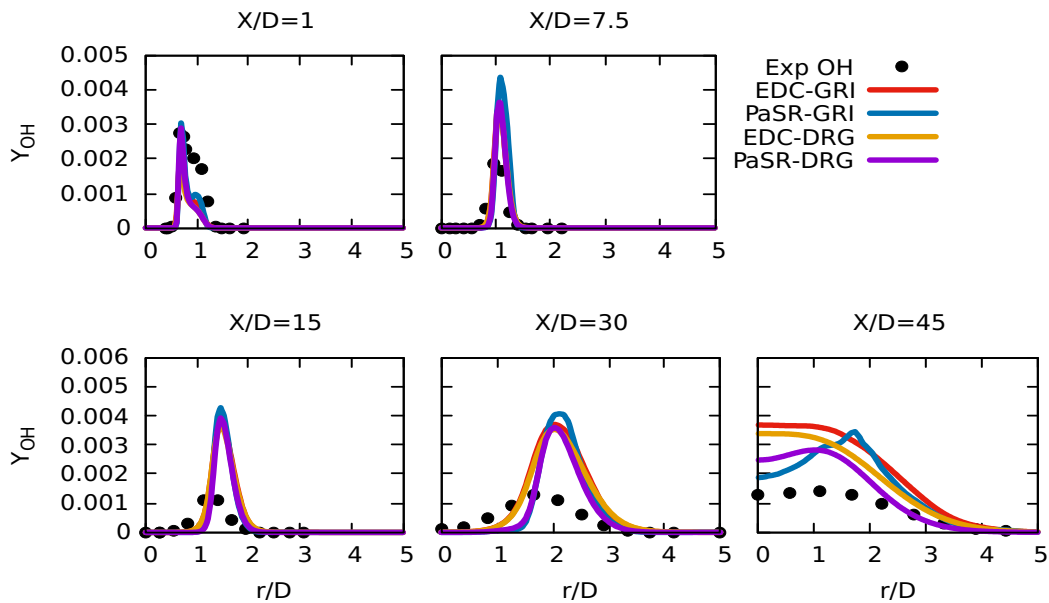


FIGURE 3.43 – Profils radiaux du OH aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia avec les modèles EDC et PaSR couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions), comparés à l'expérimental.

Application du mécanisme squelettique au modèle des flammelles

À l'aide d'un modèle de combustion des "flammelettes" nommé "Steady Laminar Flamelet Model" (SLFM), que nous avons installé dans OpenFOAM, nous avons cette fois-ci simulé la flamme D suivant un schéma RANS ; le $k - \epsilon$ standard étant le modèle de turbulence. Ajouté au mécanisme squelettique précédant, nous comparons aux mesures le mécanisme squelettique dérivant également du GRI 3.0 par le modèle de réduction DRG multi-étape. Le maillage utilisé ici est constitué de 28345 cellules. Le code Cantera présenté au Chapitre précédant a été utilisé pour générer les bibliothèques des tables pour la température et les espèces par le modèle des "flammelettes". Ces tables sont par la suite importées dans OpenFOAM pour la suite des simulations dans le but de calculer les écoulements turbulents. Les contours de température sont comparés sur la figure suivante.

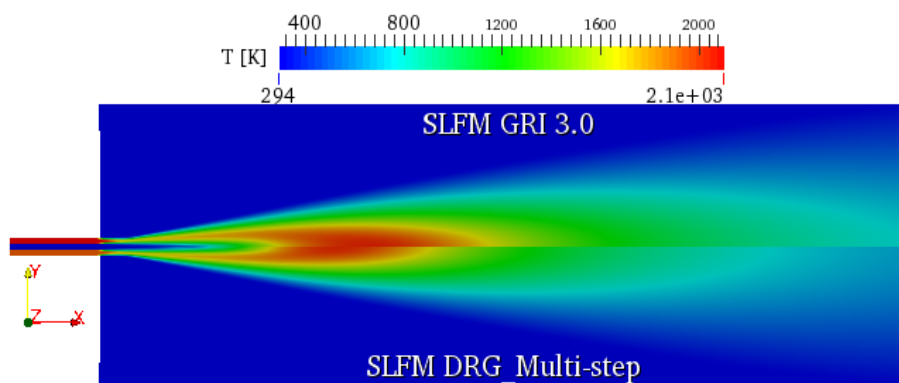


FIGURE 3.44 – Comparaison RANS des contours de température à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique du DRG multi-étape (GRI-SLFM et DRG-SLFM).

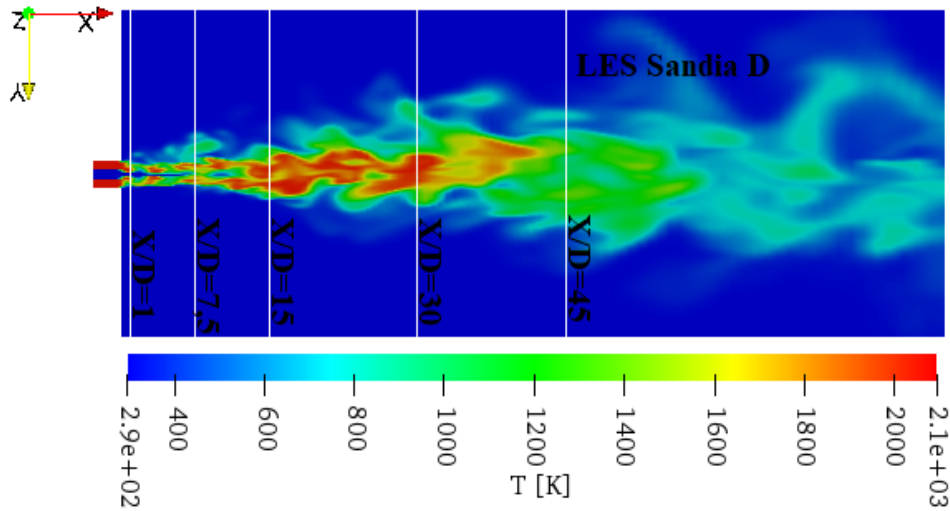


FIGURE 3.45 – Contour LES de température à l'aide du modèle SLFM couplé au mécanisme GRI 3.0 (LES GRI-SLFM).

Les contours présentés sur la figure 3.44 montre que la longueur de la flamme avec le mécanisme squelettique est plus courte qu'avec le mécanisme détaillé. Ce qui relève comme avec le PaSR, que le modèle SLFM est très sensible au processus réactionnel utilisé. Ceci pouvant s'expliquer par le fait que les "flammelettes" fortement dépendantes de la chimie constituent un ensemble de petites flammes desquelles résulte la flamme décrite par le modèle SLFM. La figure 3.45 présente la structure quasi-réelle de la flamme suivant un schéma LES.

Les vitesses radiales représentées à la figure 3.46 sont également en très bon accord avec les mesures expérimentales. Les courbes obtenues avec le modèle simplifié et le modèle détaillé se superposent correctement. Ceci pourrait démontrer que le calcul des variables dynamiques dans un écoulement turbulent ne dépend pas directement du calcul de la chimie, puisque les deux ayant été faits de manière découplée avec le modèle SLFM.

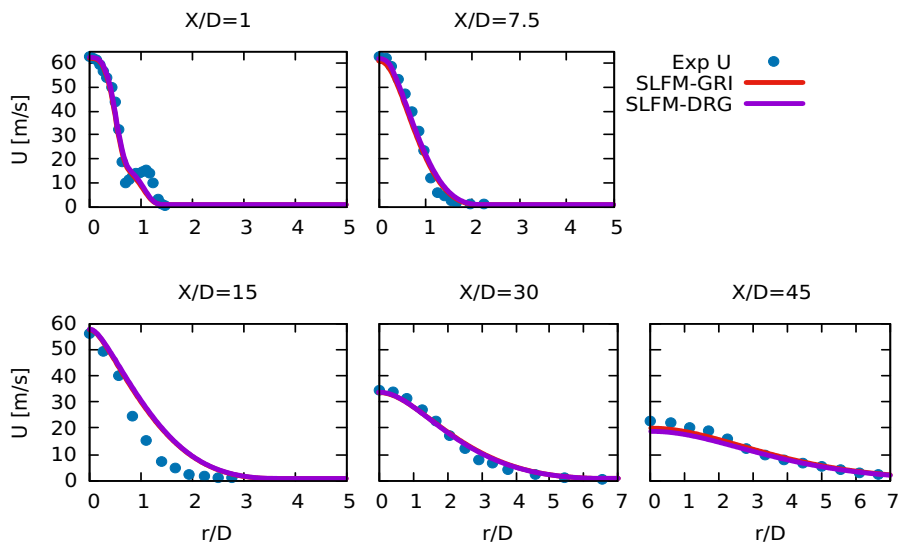


FIGURE 3.46 – Profils radiaux de la vitesse aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

La figure (3.47) présente la distribution radiale de la fraction de mélange dont les profils suivent bien les profils expérimentaux. La fraction de mélange a la capacité de tenir compte de l'advection turbulente dans les flammes de diffusion ou partiellement pré-mélangées. La fraction de mélange est un scalaire conservé qui est

représentatif d'autres scalaires conservés dans l'écoulement tels que l'enthalpie totale ou la fraction massique d'un élément chimique particulier. Par conséquent, la qualité de la prédiction du champ de fraction de mélange affecte fortement la température et la fraction massique des espèces dans la région de champ loin en aval du jet. La figure (3.47) nous révèle une sur-estimation des fractions de mélange radiale simulée près de la couche de cisaillement ($1 < r/D < 3$), à la position axiale $x/D = 15$. On observe également une sous-estimation axiale et sur-estimation près de la couche de cisaillement aux positions ($x/D = 30$ et $x/D = 45$). Pourtant, à cette région ($x/D > 45$) le phénomène important est principalement le mélange turbulent plutôt que la cinétique chimique. Ceci implique que les différences entre les résultats pourraient s'expliquer par le nombre de maille modéré ou par le schéma de simulation utilisé (RANS). Comme dans les régions $x/D > 45$ la plupart des réactions sont terminées, la fraction de mélange et le taux de dissipation contrôlent le processus de mélange et la température dans le champ d'écoulement situé loin en aval. En fait, une bonne estimation des fractions de mélange donne une indication précoce d'une meilleure prédiction dans la partie dominée par le mélange (la région éloignée en aval), pour la température et les principales espèces stables, telles que CH_4 , O_2 , CO_2 et H_2O . D'autre part, pour cartographier le processus partiellement pré-mélangé dans la partie riche en combustible du domaine ($x/D < 40$), un paramètre supplémentaire doit être pris en compte ici la variable de progression. La variable de progression pourrait rendre compte des variations chimiques dans la direction perpendiculaire au gradient de fraction de mélange. En raison du manque d'informations détaillées sur la progression de la réaction ou des informations sur les structures brûlées et non brûlées transportées dans le front de flamme, les bibliothèques de "flammelettes", qui sont déterminées par la fraction de mélange et le taux de dissipation scalaire seuls, peuvent ne pas toujours de manière exacte refléter le processus [184].

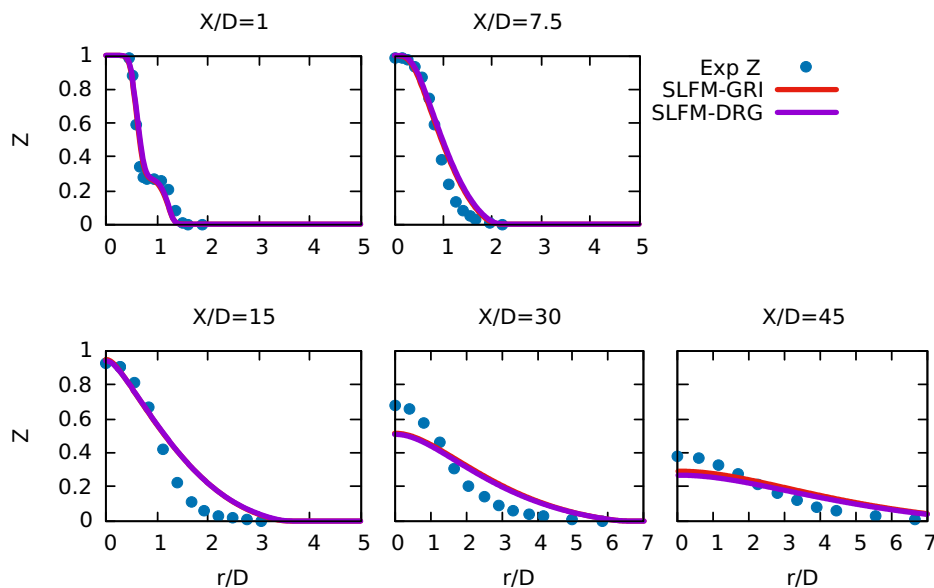


FIGURE 3.47 – Profils radiaux de la fraction de mélange (Z), aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

Les profils de vitesses moyennes le long de la ligne médiane sont donnés sur la figure 3.48. Ils présentent un bon accord du champ d'écoulement de vitesse expérimental, bien qu'il y ait quelques disparités autour de la position radiale $x/D = 15$. Cette disparité serait due aux phénomènes de mélange turbulent proche de la sortie du brûleur. Une bonne estimation du champ d'écoulement de vitesse aide à un bon calcul des scalaires conservés et de la fraction de mélange.

Les distributions de la ligne médiane calculées et comparées aux données expérimentales de la flamme Sandia D des vitesses, du taux de dissipation, de la fraction de mélange, des températures et des fractions

massiques moyennes produites de H_2O , CO_2 , CO et OH sont tracées sur la figure (3.48). On constate que les vitesses, les taux de dissipation, les fractions de mélange se superposent bien et sont en accord avec l'expérimental (Fig. 3.48(a),(e),(f)). La production des températures (Fig. 3.48(b)), est assez bien prédite par tous les mécanismes de combustion proposés. Comme le montre la Fig. 3.48(c), l'espèce H_2O produit est assez bien estimé en comparaison avec les données expérimentales et après avoir atteint la valeur maximale, il décroît en raison des réactions chimiques qui diminuent. L'espèce OH dont la prédiction est souvent quelque peu difficile, est assez bien représenté (Fig. 3.48(d)) et demeure dans la marge d'erreur avec les mécanismes (un détaillé et deux simplifiés). En ce qui concerne le CO_2 , les courbes sont représentées à la figure 3.48(h) montrent que les deux mécanismes suivent la même tendance et sont en accord avec l'expérimental. La fraction massique de CO calculée à l'aide du mécanisme simplifié, semblent être les meilleures approches des valeurs expérimentales (Fig. 3.48(g)). De manière générale, toutes ces courbes représentant l'évolution des températures et des espèces ont montré qu'ils ont une tendance à suivre mieux la branche descendante de la courbe expérimentale, mais une plus grande divergence dans sa branche ascendante. Les temps de simulation nécessaires pour atteindre des conditions d'état stable sont évidemment plus petites pour les mécanismes squelettiques lors des calculs de la chimie dans cantera et des écoulements turbulents dans le CFD OpenFOAM.

Pour améliorer les simulations, il serait nécessaire d'introduire le paramètre supplémentaire chimiquement dynamique qui est appelé, variable de progression.

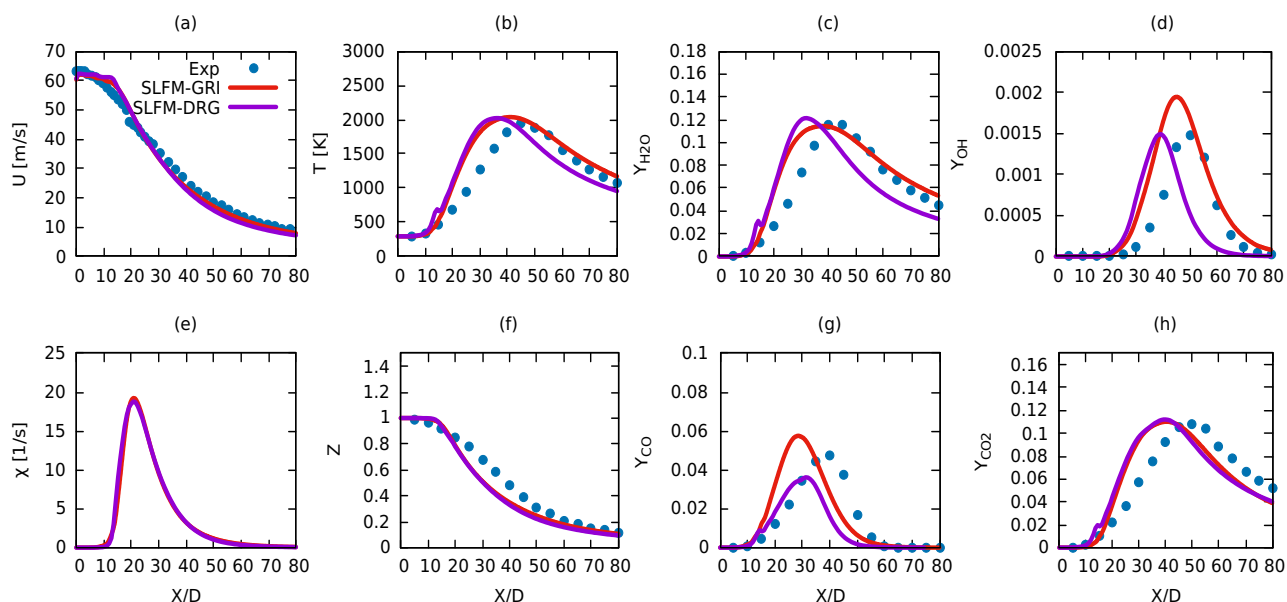


FIGURE 3.48 – Profils axiaux de la vitesse, la température, le taux de dissipation, la fraction de mélange, les espèces H_2O , OH , CO et CO_2 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

La figure 3.49 présente les profils de température. Le modèle cinétique squelettique, comme le modèle GRI 3.0 suit très bien la dynamique chimique dans la région proche en aval principalement $X/D = 1$. À $X/D = 7,5$ et 15 , la partie ascendante des courbes est plus proche des valeurs expérimentales que la partie descendante représentant la couche de cisaillement. La dynamique chimique n'est pas bien représentée dans cette région. La même observation est faite à $X/D = 30$ et 45 à la différence qu'à la position $X/D = 30$, la valeur axiale est surestimée ; due au fait que la valeur maximale de la température suivant l'axe centrale est prédite avant la stoechiométrie expérimentale (voir Fig.3.48(a)). La sous-estimation du combustible, CH_4 , à $X/D = 30$ sur la figure 3.50 peut entraîner une sur-estimation de la température et des produits dans la même région. C'est ce qui expliquerait la surestimation de la température, du H_2O et CO_2 à $X/D = 30$. Cependant, la courbe de fraction massique du combustible CH_4 montre que les valeurs calculées atteignent sa

valeur minimale exactement au même endroit radial où se produit le pic de température. Tous les modèles de flammelettes sont basés sur l'hypothèse d'une zone de réaction mince. Cela implique une chimie rapide dans la dynamique de réaction. Ainsi, les radicaux, ou les espèces instables, comme le CO peuvent ne pas être prédits avec précision. D'autre part, les fractions massiques des espèces intermédiaires sont prédites à des valeurs plus élevées que les résultats expérimentaux dans les modèles moyens de Reynolds. Ceci est principalement dû à la définition ou à l'approche de modélisation du taux de dissipation scalaire du temps de séjour. Le taux de dissipation scalaire étant exprimé en termes de variance scalaire moyenne et de temps de turbulence dans les simulations RANS.

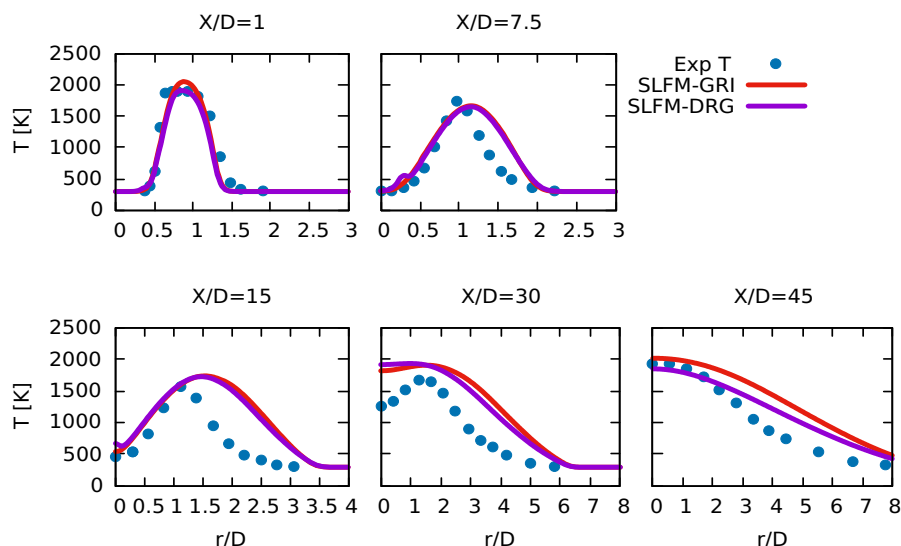


FIGURE 3.49 – Profils radiaux de la température aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

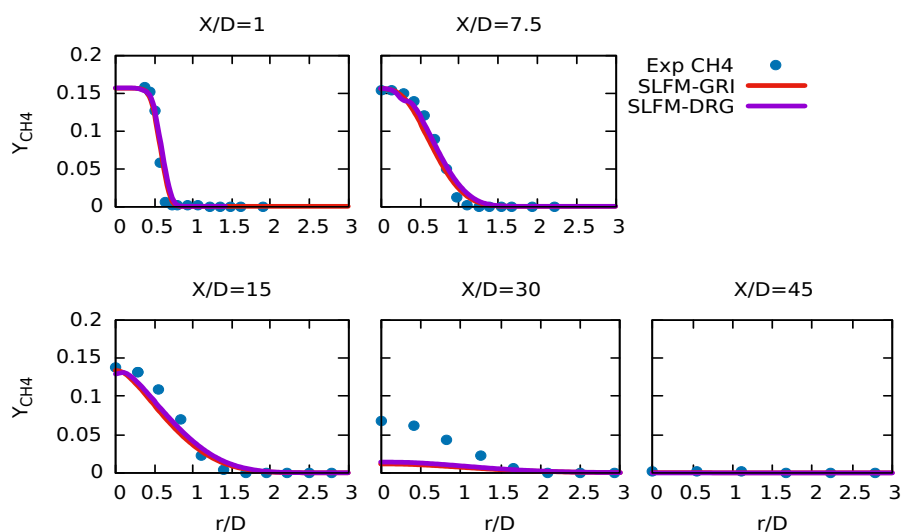


FIGURE 3.50 – Profils radiaux du CH_4 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

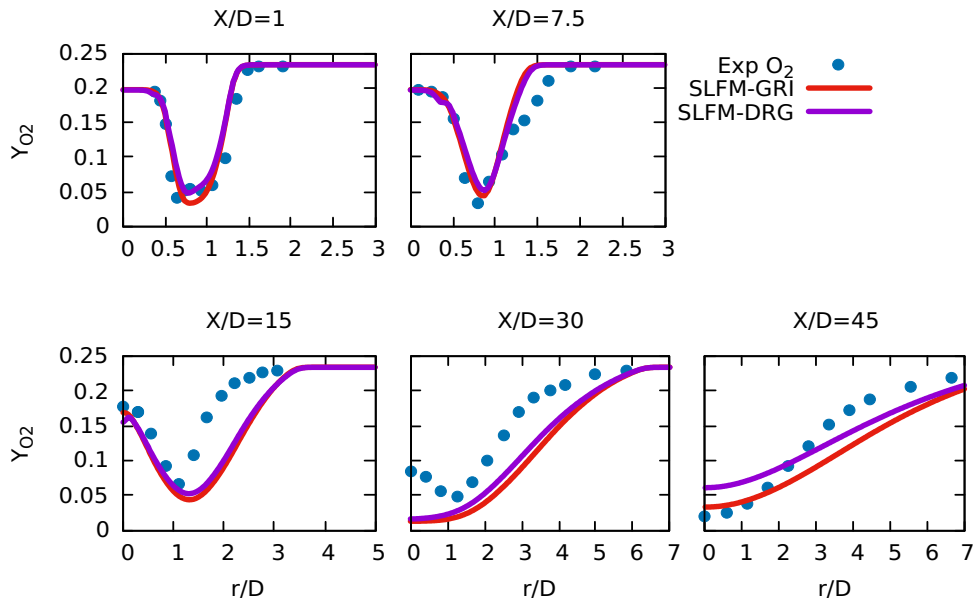


FIGURE 3.51 – Profils radiaux du O_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

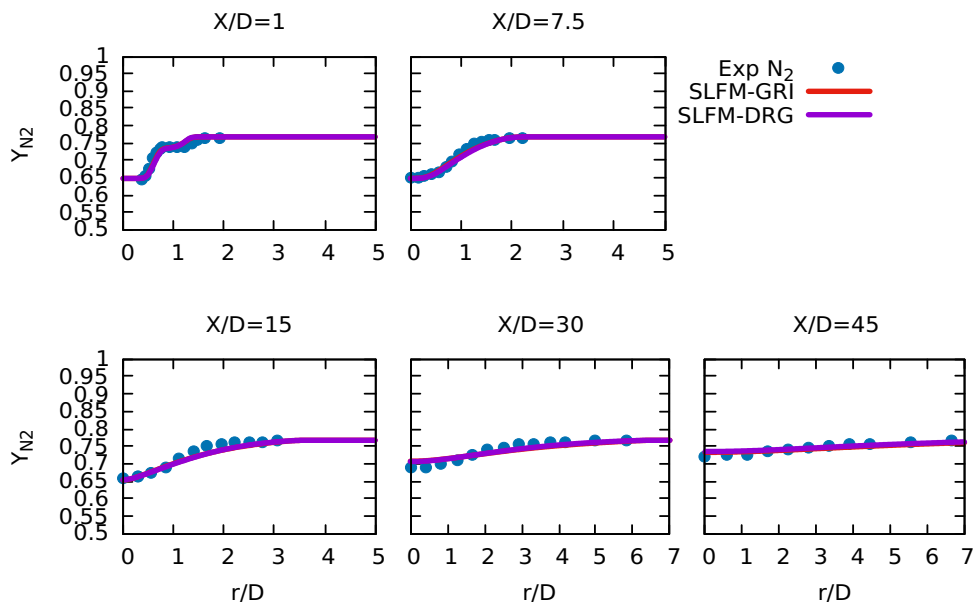


FIGURE 3.52 – Profils radiaux du N_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

Les comparaisons entre les profils radiaux des autres valeurs moyennes des scalaires simulés (O_2 , N_2 , CO_2 , CO , H_2O et OH) par le modèle SLFM et les données expérimentales sont également présentées (figures 3.51 à 3.56). De manière générale, le mécanisme détaillé et le dérivé squelettique ont la même tendance et en accord avec les valeurs expérimentales (O_2 , N_2 et CO_2). Les profils et les performances de la fraction massique de CO_2 sont similaires à ceux de la température moyenne. Ce fait indique que le dégagement de chaleur majeur est étroitement corrélé à la formation de CO_2 . Il y a néanmoins une surestimation des profils autour de sa valeur maximale. Le mécanisme réduit semble avoir une estimation pour les profils de CO .

Sur toutes ces courbes, le pré-mélange partiel commence à affecter la dynamique chimique dans la région $x/D = 30$. Les modèles tel que celui SLFM prenant en compte les phénomènes de pré-mélange partiel peuvent prédire avec précision le champ de température et des autres scalaires du côté riche en combustible. C'est ce

qui explique que la qualité des prédictions pour les autres scalaires dans la partie riche en combustible est en accord avec l'expérience. Ceci serait encore mieux défini non seulement par l'effet des variables de progression que l'on peut utiliser pour imiter le processus de pré-mélange partiel, mais aussi la prise compte du temps de séjour individuellement pour chaque cellule afin de refléter la caractéristique instable des interactions entre la vitesse de déformation et les effets thermochimiques. Cela améliorerait les prédictions dans les régions dominées par la chimie, comme celles dominées par la turbulence.

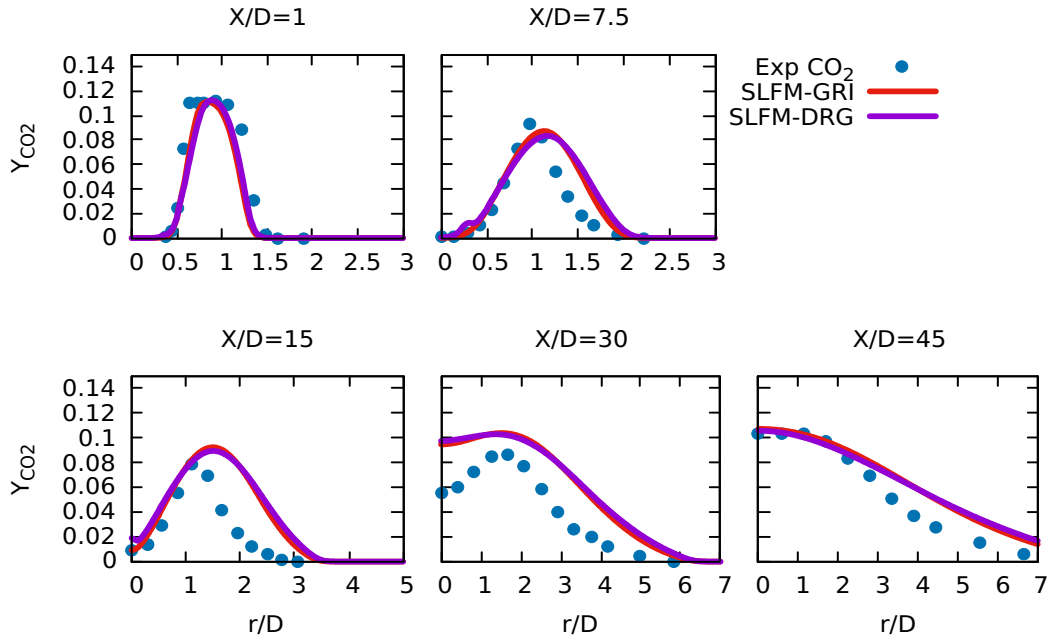


FIGURE 3.53 – Profils radiaux du CO_2 aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'experimental.

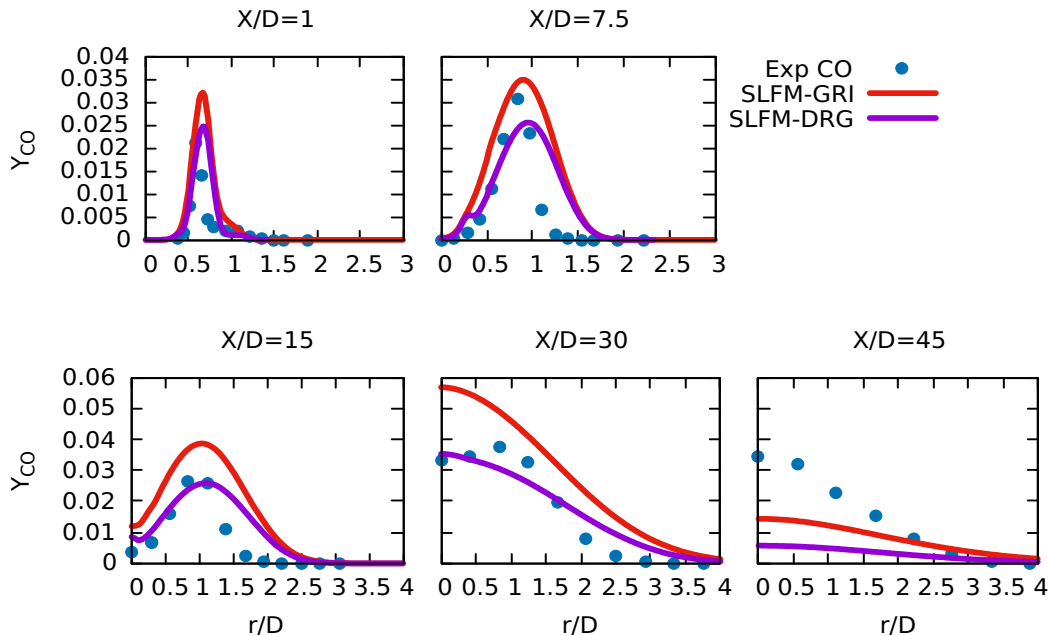


FIGURE 3.54 – Profils radiaux du CO aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'experimental.

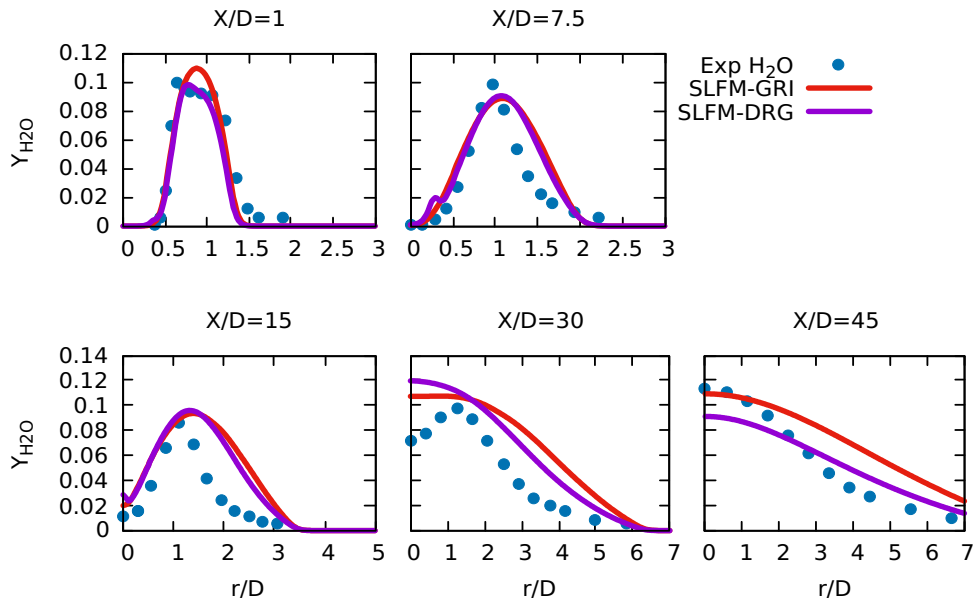


FIGURE 3.55 – Profils radiaux du H_2O aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

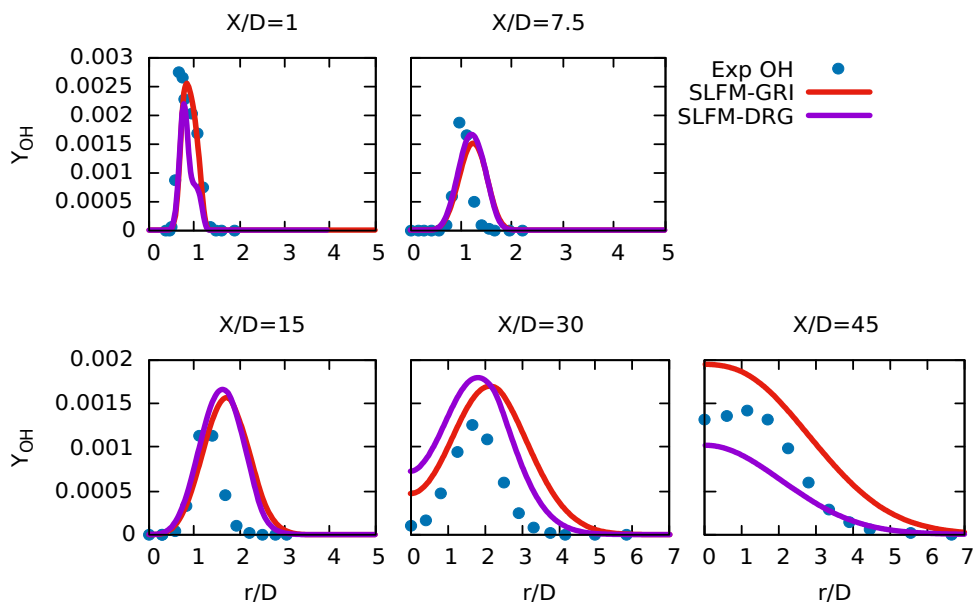


FIGURE 3.56 – Profils radiaux du OH aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

Température et espèces en fonction de la fraction de mélange

Les courbes de température et espèces en fonction de la fraction de mélange sont représentées sur les figures 3.57 à 3.65. Le tracé des barres sur chacune d'elles représentant la fraction de mélange à la stœchiométrie permet de définir les régions du mélange stœchiométrique calculé et mesuré. La fraction de mélange à la stœchiométrie se définit par $Z_{st} = \frac{Y_{O_2}}{\nu Y_F + Y_{O_2}}$ où ν est le coefficient stœchiométrique, Y_{O_2} la fraction massique du dioxygène de l'air et Y_F la fraction massique du combustible. Lorsque $Z < Z_{st}$, on est dans la région de combustible déficitaire (la fraction massique des gaz brûlés est nulle). Le mélange est pauvre en combustible et la combustion s'achève lorsque celui-ci est totalement consommé. Lorsque $Z > Z_{st}$ l'oxygène est en manque le mélange est riche en combustible. Au regard des courbes sur les figures 3.57 à 3.65 montrant

que seuls les scalaires tels que la température, les fractions massiques de CH_4 , de H_2O et de OH présentent des points de changements allant de la région de combustible pauvre à la région de combustible riche proche de la fraction de mélange stœchiométrique Z_{st} .

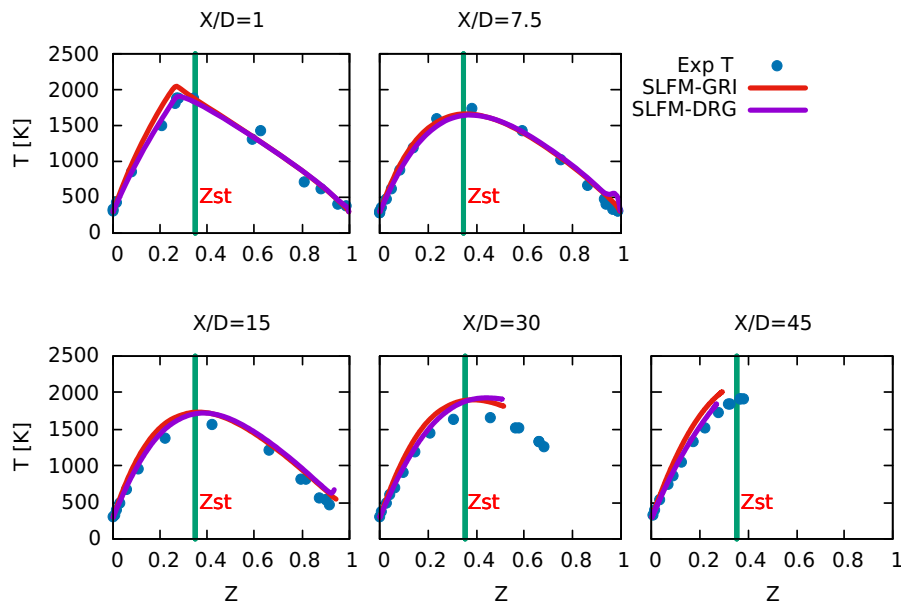


FIGURE 3.57 – Profils radiaux de température dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

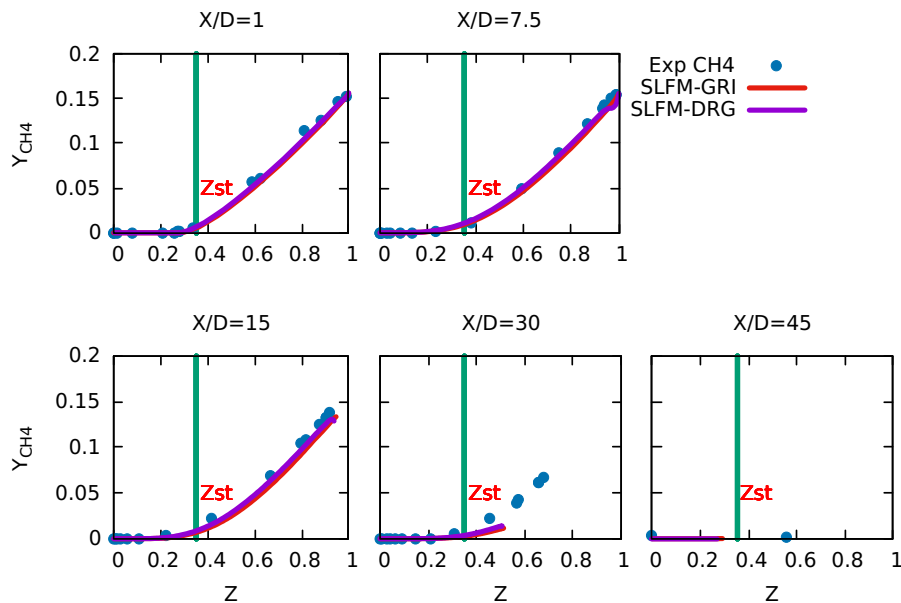


FIGURE 3.58 – Profils radiaux du CH_4 dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

L'observation principale sur les figures 3.57 à 3.65 est que les prédictions faites à l'aide des simulations DRG multi-étape sont presque indiscernables de celles d'intégration directe du mécanisme détaillé, en particulier lorsque les quantités (la température et les principales espèces) sont comparées en fonction de la fraction moyenne du mélange. Une très bonne corrélation entre le champ de données d'expérience et de simulation est observée dans les différentes régions amont et aval. En aval, $x/D = 30$ et 45 , dans la zone stœchiométrique, on observe de légères disparités entre les modèles de cinétique et l'expérimentale. Cette cohérence avec l'ex-

périmental révèle que les champs scalaires de température moyenne et d'espèces chimiques sont fortement corrélés avec la fraction de mélange, par conséquent, l'écart dans la fraction de mélange affecte les profils d'espèces et de température.

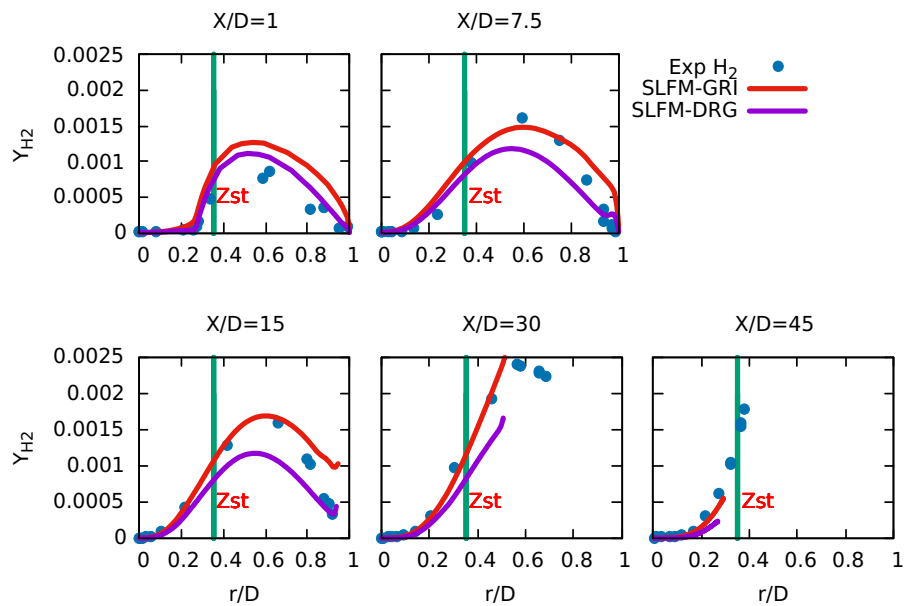


FIGURE 3.59 – Profils radiaux du H_2 dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

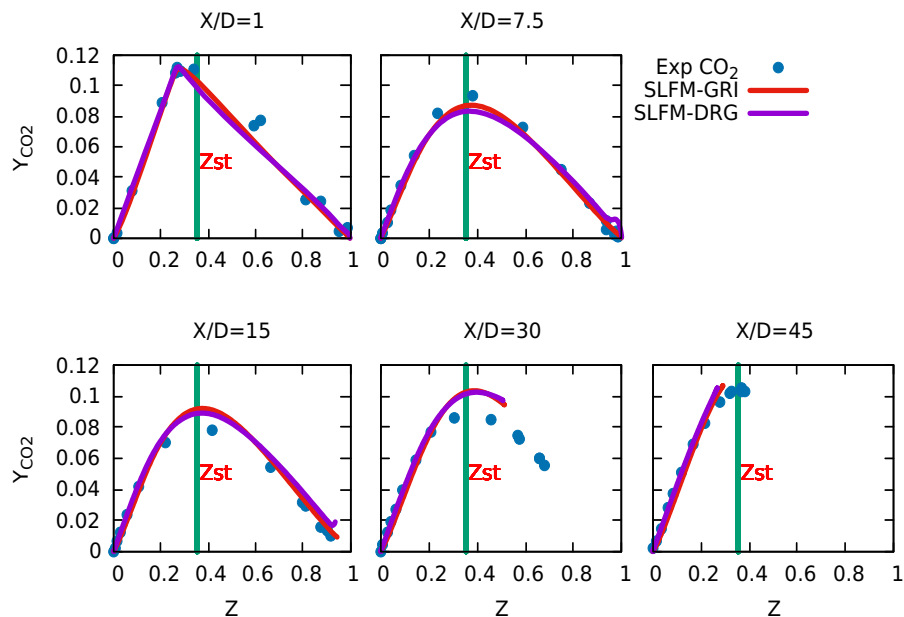


FIGURE 3.60 – Profils radiaux du CO_2 dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

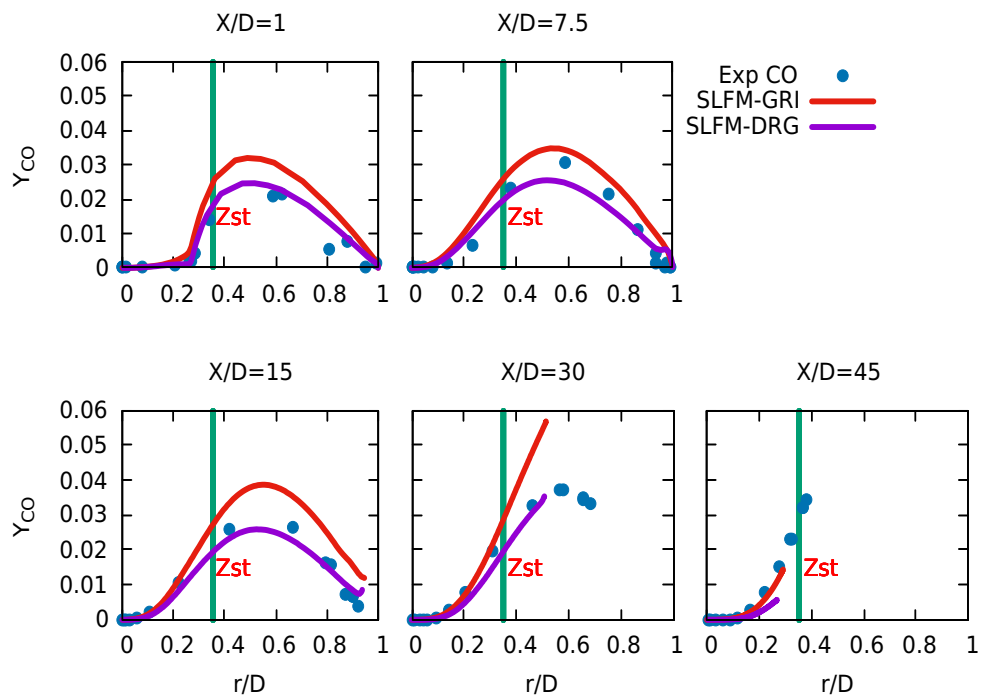


FIGURE 3.61 – Profils radiaux du CO dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

Dans l'ensemble, le mécanisme réduit par DRG montre une excellente capacité à reproduire les effets chimiques à taux fini du mécanisme d'origine dans cette flamme. En particulier, les taux de consommation d' O_2 , de N_2 et de CH_4 et de production de H_2O , de CO_2 et de OH sont reproduits avec une excellente précision. Les valeurs maximales de température et de produits chimiques sont relativement plus élevées avec le mécanisme détaillé. Les espèces H_2 et CO présentent une différence selon les modèles cinétiques utilisés. Remarquablement, la fraction massique moyenne de CO est bien prédite à la fois par le modèle DRG à plusieurs endroits. La surestimation couramment rencontrée du CO dans les régions riches en combustibles dans plusieurs études précédentes est relativement faible dans les résultats obtenus dans cette étude. Le mécanisme C_2 DRG-réduit montre une fois de plus un excellent accord avec les prédictions détaillées du GRI 3.0, à part quelques divergences dans la prédiction des quelques espèces. Les fractions massiques de N_2 ont une tendance identique à l'expérimentale sous forme d'une droite, traduisant que le N_2 est inerte dans les écoulements réactifs de combustion, bien que participant à la production des polluants du type NO .

Pour $x/D = 30, 45$ les profils de température et de fraction massique de toutes les espèces correspondent assez bien aux données expérimentales du côté pauvre, mais ont tendance à surestimer la conversion du combustible en produit du côté riche. Les valeurs de la fraction de mélange du côté du combustible riche sont inférieures à la valeur expérimentale. Ceci peut être attribué au fait que le modèle RANS ne permet pas d'observer l'extinction locale de la flamme.

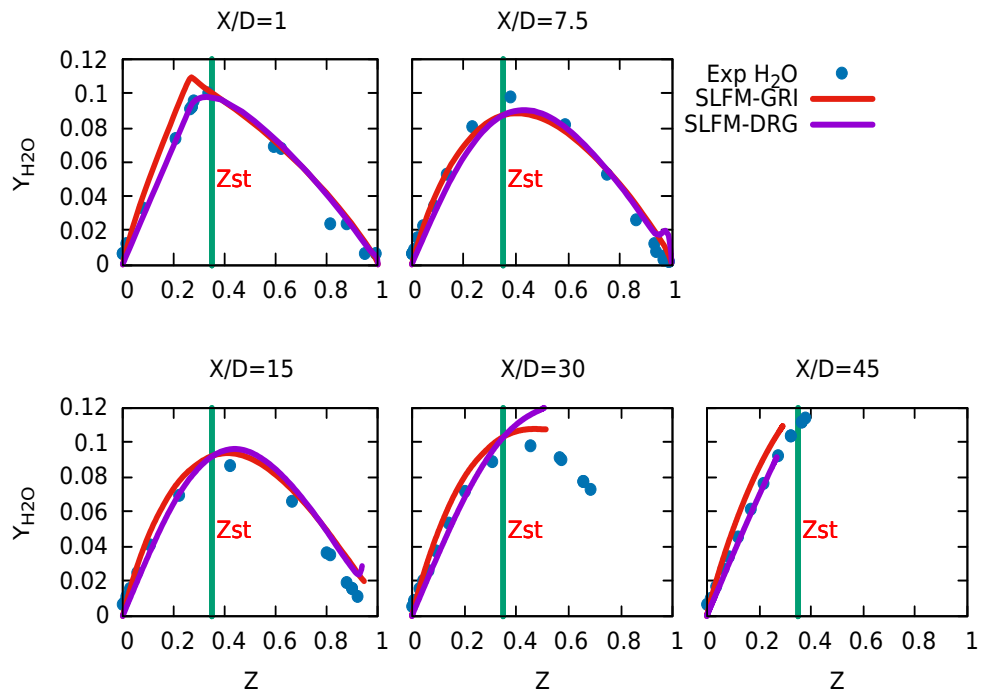


FIGURE 3.62 – Profils radiaux du H_2O dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

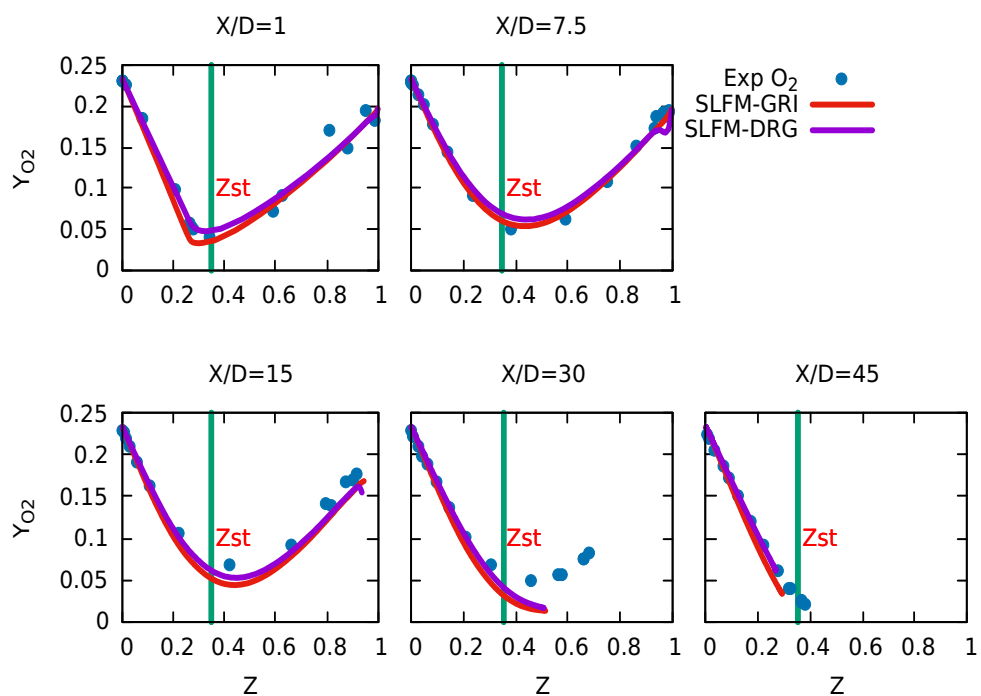


FIGURE 3.63 – Profils radiaux du O_2 dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

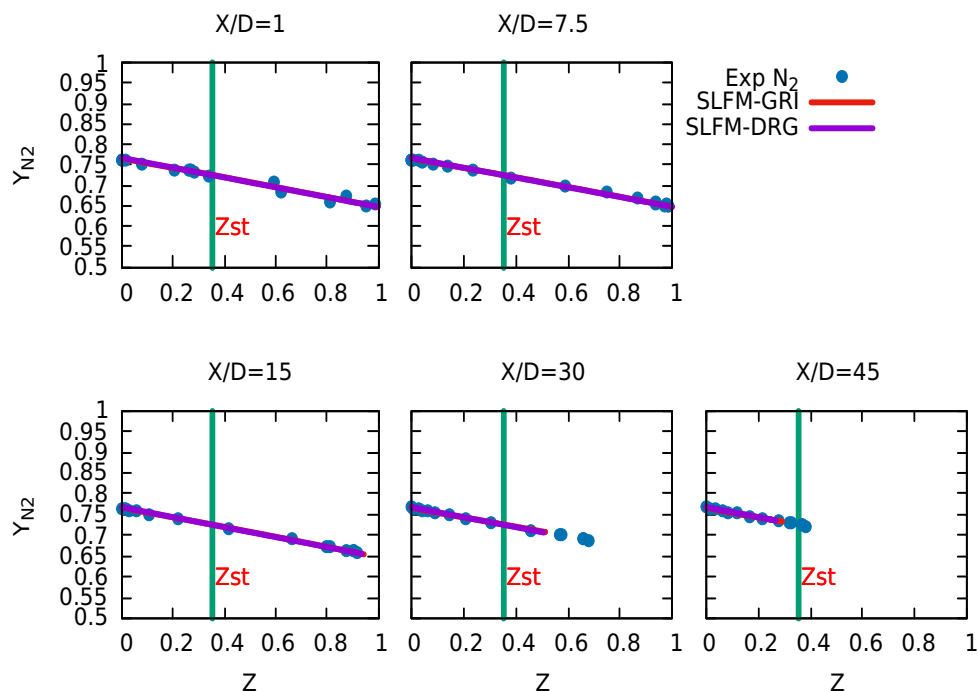


FIGURE 3.64 – Profils radiaux du N_2 dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

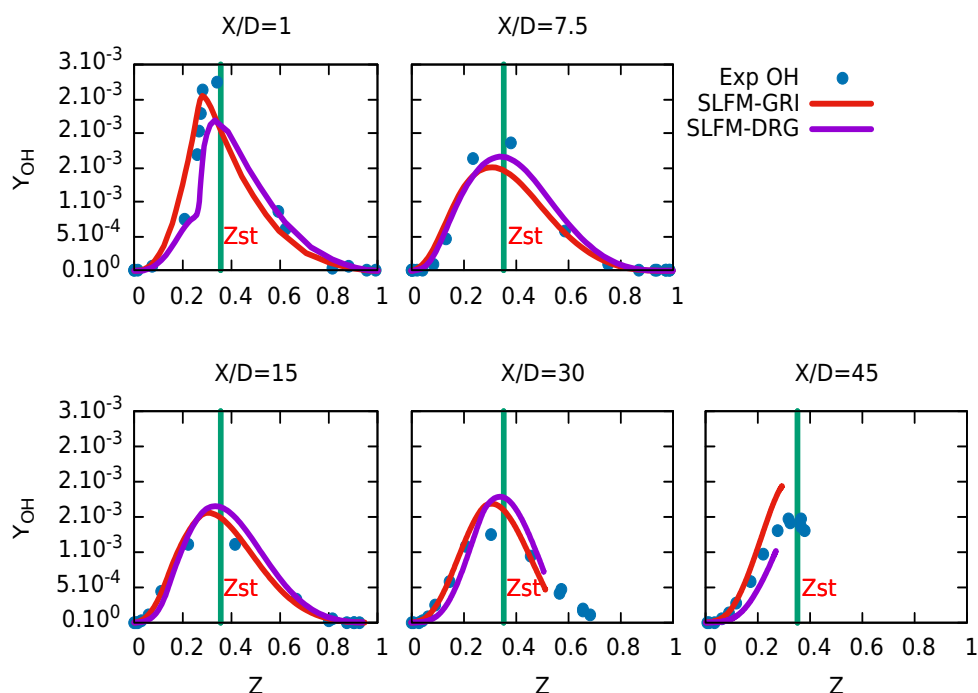


FIGURE 3.65 – Profils radiaux du OH dans l'espace de la fraction de mélange aux positions $X/D = 1, 7.5, 15, 30$ et 45 de la flamme D de Sandia à l'aide du modèle SLFM couplé aux mécanismes GRI 3.0 et squelettique C_2 (20 espèces et 47 réactions) et comparés à l'expérimental.

Une comparaison des profils 3D de la température en fonction du taux de dissipation du scalaire et de la fraction de mélange et présentée dans la figure 3.66. On observe premièrement que l'évolution du profil du GRI 3.0 est quasi uniforme quand le taux de dissipation augmente sauf au niveau de la zone ou la ligne autour de la fraction de mélange stœchiométrique qui présente les pics de température. La même ligne stœchiométrique est identifiable sur la courbe du DRG. Mais cette courbe présente quelques oscillations lorsque le taux de dissipation augmente cela pourrait être dû à la présence des extinctions locales, suivies des rallumages à des

différentes valeurs du taux de dissipation scalaire qui varie de 0 à 20 s^{-1} dans les deux profils (Fig.3.66). On observe également une augmentation de la fraction de mélange stoechiométrique lorsque le taux de dissipation scalaire augmente. Le mécanisme compact taillé selon la dimension de la flamme permet donc d'identifier le mieux sa structure en représentant le mieux les phénomènes locaux.

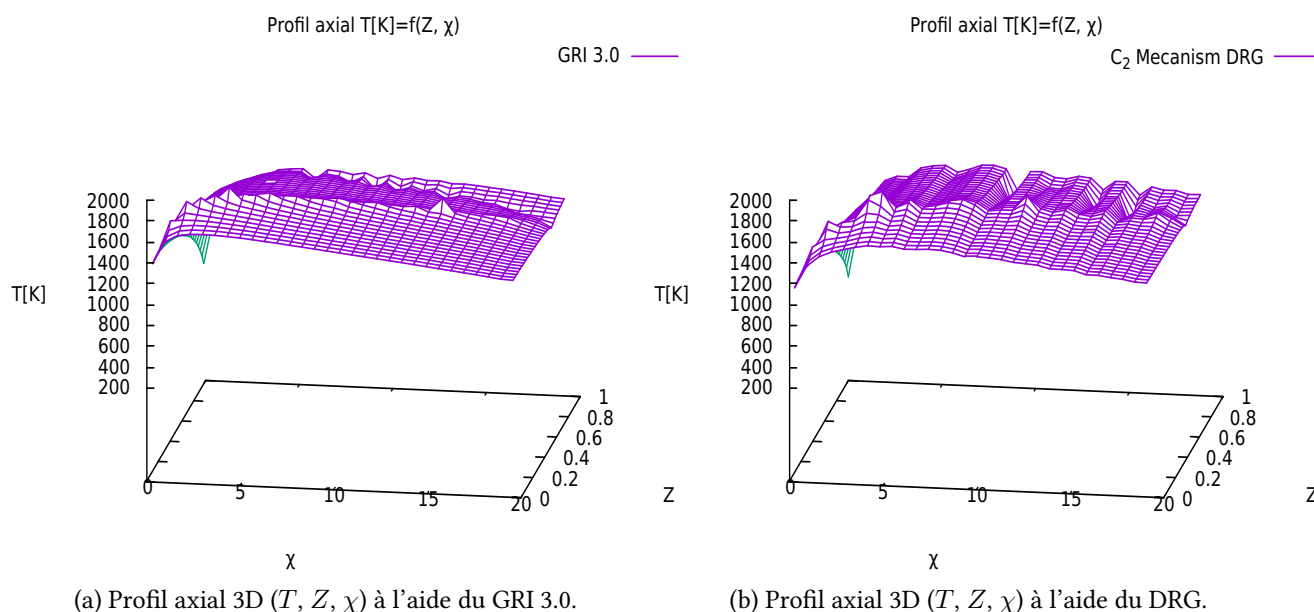


FIGURE 3.66 – Comparaison 3D suivant les profils axiaux de la température en fonction du taux de dissipation du scalaire χ et la fraction de mélange Z , avec les mécanismes GRI 3.0 à gauche et squelettique C_2 à droite.

En résumé, les résultats conditionnés par la fraction de mélange, prédits avec le modèle SLFM, sont globalement en bon accord avec les données expérimentales des côtés pauvre et riche du combustible. La surestimation des pics des fractions massiques des espèces CO et H_2 du combustible est attribuée à la limitation du modèle de flammelette laminaire stable. La consommation de combustible et la zone de réaction partiellement pré-mélangée sont assez bien estimées. À partir des résultats, on peut conclure que le modèle SLFM est suffisant pour la simulation de la Flamme D de Sandia. Une extension de ce modèle permettrait néanmoins une bonne prise en compte des différents problèmes intervenant dans les flammes partiellement pré-mélangées tels que la capture des fortes extinctions locales et des événements de rallumage ultérieurs, ce qui corrobore avec la présente configuration. Une extension avec le modèle MIL (Modèle Intermittent Lagrangien) par exemple permettrait de relever ces insuffisances. Le modèle de cinétique réduit implémenté permet également de faire une économie énorme des temps de calculs tout en reproduisant les mêmes profils que le GRI 3.0. La présentation de diagrammes de dispersion de la combustion est faite dans la section suivante.

3.2.4 Diagramme de dispersion de la flamme D

Les diagrammes de dispersion de la température pour les trois flammes aux stations 7,5D, 15D et 30D sont représentés sur la figure.3.67. Dans l'ensemble, les diagrammes de dispersion montrent que l'intégration directe du mécanisme détaillé et les mécanismes réduits par DRG multi-étapes sont capables de prédire une quantité d'extinction. Cette comparaison avec le diagramme réel, permet de voir que les résultats moyens du DRG et de l'intégration directe du mécanisme complet sont en excellent accord. Les résultats RANS représentent de manière satisfaisante la moyenne du diagramme de dispersion. Les résultats LES suivent également une assez bonne tendance au regard de l'évolution de la température et de la fraction massique de OH. Mais, ils présentent néanmoins quelques disparités dues au fait que la convergence LES ne soit bien stable.

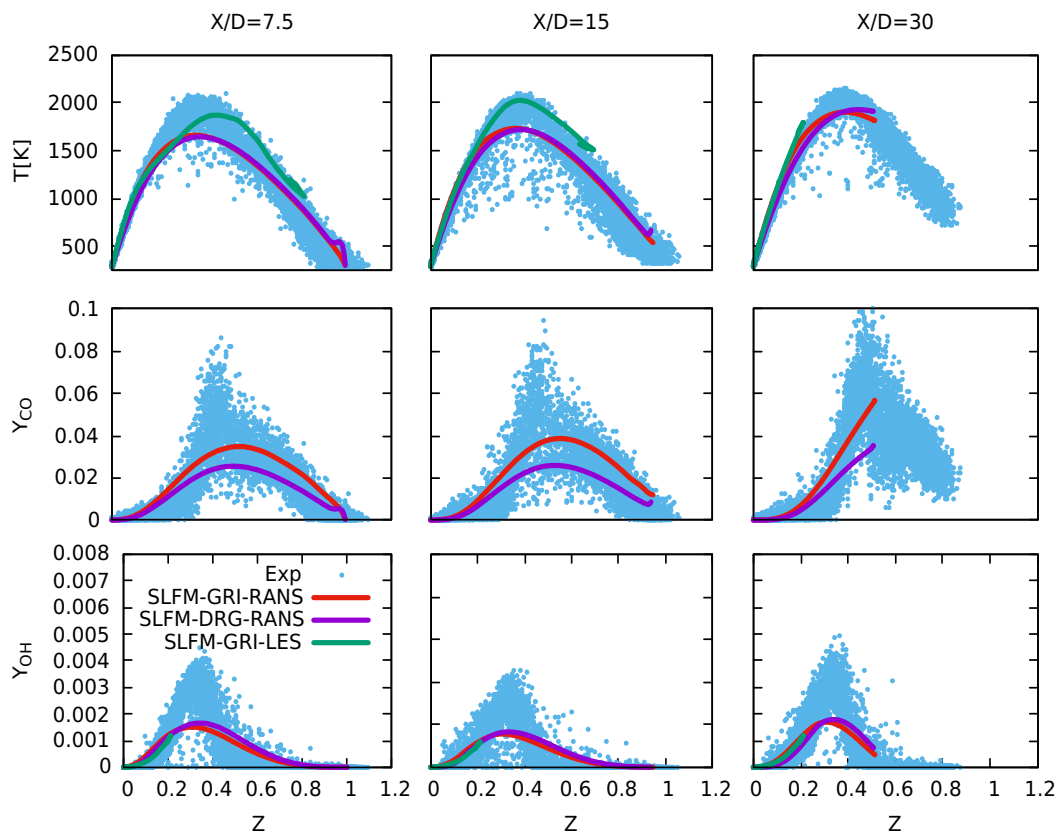


FIGURE 3.67 – Diagrammes de dispersion de la température, les espèces CO et OH comparés aux valeurs moyennes.

De nombreuses particules à plus basse température sont probablement des particules résultant d'un mélange entre des particules chaudes et froides, mais n'ont pas résidé assez longtemps dans la zone de réaction pour s'enflammer. Ces particules semblent être diffusées loin de la zone de réaction en raison d'une diffusion turbulente excessive. En général, on peut conclure que l'accord entre l'intégration directe et le DRG est très bon mais il y a un écart considérable dans la comparaison avec les expériences, qui est dû aux lacunes du modèle SLFM.

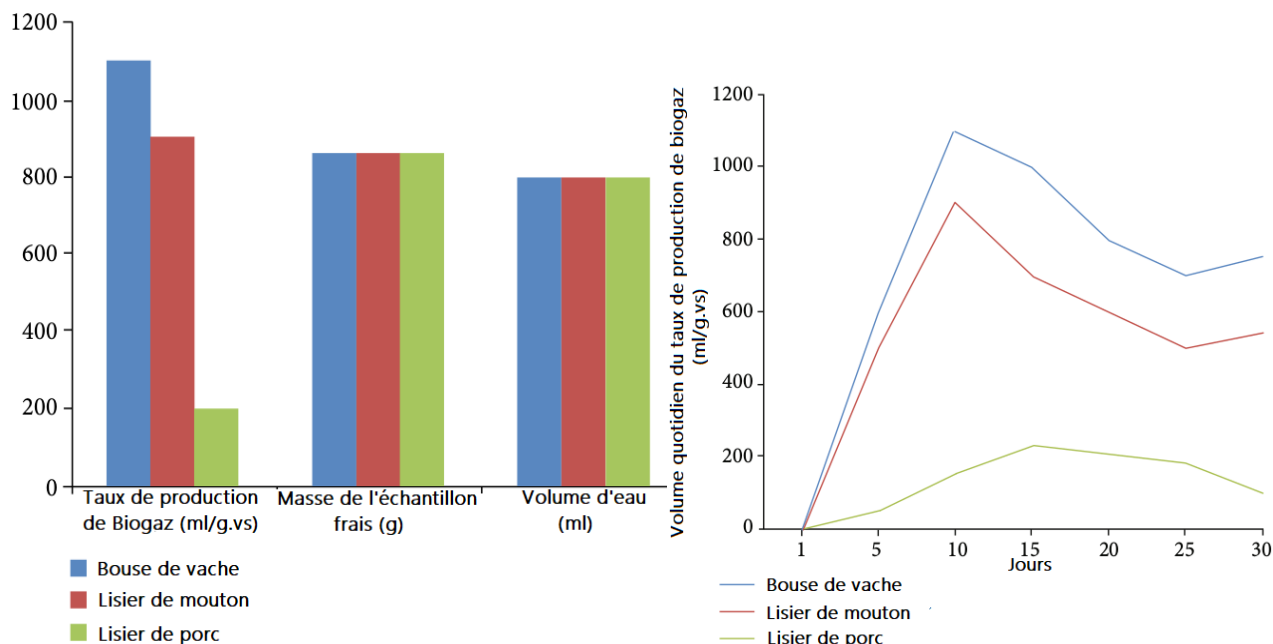
L'analyse des statistiques lagrangiennes de la température du gaz et des fractions massiques (CO et OH) indique que la combustion partiellement pré-mélangée prévaut près de la sortie de la buse du spray, tandis que plus en aval, la flamme non pré-mélangée est favorisée vers le côté riche interne du jet de pulvérisation. Ce phénomène est dû au fait que la flamme pilote chauffe la zone de pulvérisation interne pré-mélangée.

3.3 Caractérisation et combustion turbulente des biogaz

3.3.1 Caractérisation des biogaz

Pour choisir les caractéristiques des biogaz à appliquer dans la suite de ce travail, nous avons utilisé les résultats de recherche de Gemechu [185] dont l'étude vise à analyser les effets de la température (°C), du temps de rétention (en jours) et du potentiel des déchets animaux sur la production de biogaz et ses compositions en tant que réponses aux facteurs de l'étude. Les matières premières utilisées dans cette étude étaient de la bouse de vache, du fumier de mouton et du fumier de porc. Des digesteurs discontinus anaérobies (bouteille d'eau en plastique) d'un volume total de 2000 ml ont été utilisés comme digesteur (bioréacteur) dans cette expérience. L'analyse de la composante gaz montre le volume important de composante méthane enregistré dans la bouse de vache (66,9%) suivie par le fumier de mouton (62,1%). La bouse de vache était l'une des meilleures pour produire du biogaz, tandis que le fumier de mouton était moyen et le fumier de porc est moins producteur que les autres. La figure 3.68 présente la comparaison des potentiels de production du biogaz à partir des trois

types de matière premières organiques utilisés. Dans le traitement d'une quantité égale d'eau et de taille de l'échantillon, le maximum de biogaz (1100 ml) a été produit à partir de bouse de vache. De même, une bonne qualité de biogaz a été produite à partir du fumier de mouton. La bonne qualité du rendement en méthane (58%) du fumier de mouton a été trouvée comme valeur optimale. Il faut toutefois noter que la qualité du biogaz dépend de la qualité des déchets organiques utilisés qui eux même dépendent du type d'aliment consommé par l'animal.



(a) Taux de production de biogaz, taille et élément des digesteurs. (b) Production quotidienne dans trois échantillons.

FIGURE 3.68 – Comparaison des potentiels de production de trois types de matière premières organiques (bouse de Vache, lisier de Mouton et lisier de Porc) [185].

Tableau 3.5 – Composition en volume molaire du Biogaz selon le type de substrat utilisé.

\Biogaz	lisier de Vache (BG-V66.9)	lisier de Mouton (BG-M62.1)	lisier de Porc (BG-P56.1)
Constituant			
X_{CH_4} (%)	66,9	62,1	56,1
X_{CO_2} (%)	33,1	37,9	43,9

Le contenu énergétique du biogaz dépend principalement de son contenu en méthane. Ainsi, la présence de dioxyde de carbone, d'azote, de vapeur d'eau et autres gaz rend la combustion du biogaz moins exo-énergique que celle du butane (contenu énergétique environ deux fois plus élevé) ou du méthane pur (plus de deux fois plus élevé). Le tableau 3.5 présente les différentes compositions de biogaz en fonction du déchet du type animal transformé.

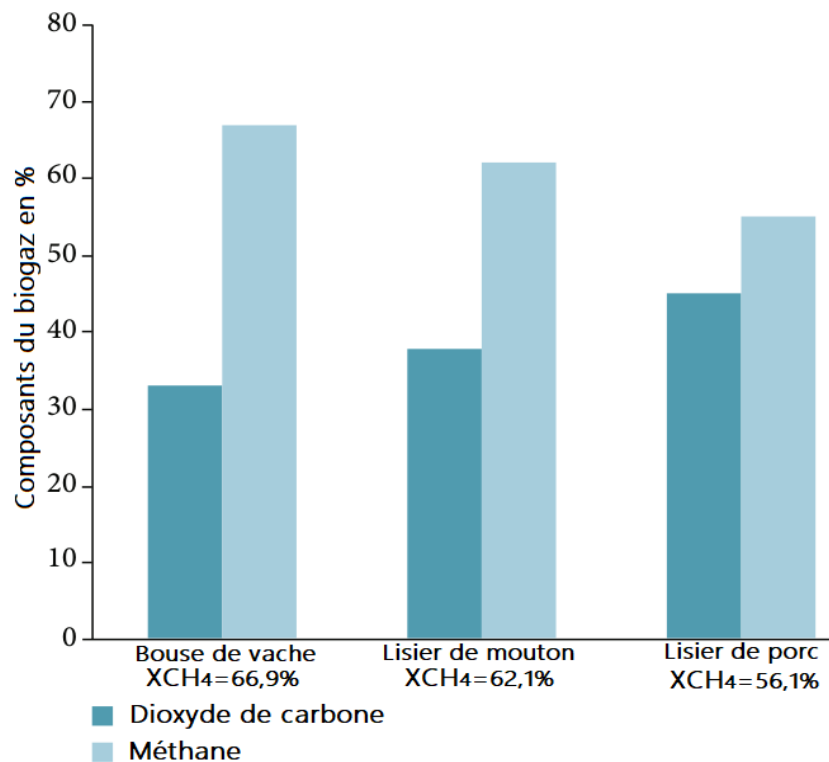


FIGURE 3.69 – Caractérisation et composition des biogaz issus des déchets organique d'origines animales (bouse de Vache, lisier de Mouton et lisier de Porc).

3.3.2 Combustion turbulente des biogaz dans configurations expérimentales

Dans cette partie, la combustion non pré-mélangée et partiellement pré-mélangée d'un combustible traditionnel "le CH₄" (le constituant majoritaire du gaz naturel) et d'un combustible alternatif "le biogaz" (constitué en majorité de CH₄ et CO₂) est simulée dans des géométries des chambres de combustions expérimentales à écoulements turbulents. Les simulations de combustion 2D axisymétrique sont validées et les résultats de la combustion des deux gaz sont comparés et analysés afin d'évaluer les résultats. Il est question de comparer et d'évaluer la viabilité des biogaz comme combustible alternatif pour une utilisation dans les chambres de combustion industrielle. Les performances de combustion sont évaluées en fonction de plusieurs paramètres d'optimisation de la performance de combustion, à savoir l'efficacité de combustion et les émissions de polluants (CO et NO).

Substitution du méthane par les biogaz

Les biogaz étant choisis, il est question dans la suite de les tester dans les configurations expérimentales dont les simulations ont été précédemment effectuées à savoir les flammes DLR-A et Sandia-D. Pour évaluer les capacités du Biogaz à être une source alternative au gaz naturel ou au méthane dans les systèmes de combustion industriels, nous remplaçons simplement le CH₄ dans sa proportion définie dans le combustible pour chaque flamme étudiée. Les biogaz issus des déchets de Vache, de Mouton et de Porc sont nommés respectivement par **BG-V66.9**, **BG-M62.1** et **BG-P56.1** et les compositions des combustibles des différentes flammes de biogaz-Air sont les suivantes :

- **Jet simple** : respectivement à 22.1%, 33.2% et 44.7% de mélange Biogaz\H₂\N₂, on a les flammes : **Jet-BGV**=BG-V66.9\H₂\N₂, **Jet-BGM**=BG-M62.1\H₂\N₂ et **Jet-BGP**=BG-P56.1\H₂\N₂
- **Pilote** : respectivement à 25% 75% de mélange Biogaz\Air, on a les flammes :

Pilote-BGV=BG-V66.9\Air, **Pilote-BGM**=BG-M62.1\Air et **Pilote-BGP**=BG-P56.1\Air

En calculant la fraction massique de chaque espèce à l'aide de la formule

$$Y_i = \frac{X_i W_i}{\sum_{i=1}^{N_{sp}} X_i W_i} \quad (3.3)$$

où X_i désigne la fraction molaire, W_i la masse molaire de l'espèce i choisie et N_{sp} le nombre d'espèces. Ainsi, on obtient les tableaux 3.6 et 3.7.

Le tableau 3.6 présente les différentes fractions massiques des flammes aux Biogaz calculées dans la même proportions que le méthane et les mêmes conditions de la DLR-A (températures initiales de combustible et d'air sont à 292 K). La buse à jet du combustible a un diamètre de $D = 8$ mm, avec une vitesse apparente $U_0 = 42,2$ m/s entourée d'un co-courant d'air à faible vitesse (0,3 m/s).

Tableau 3.6 – *Composition en fraction massique des combustibles des flammes à jet simple de Biogaz.*

	Y_{CH_4}	Y_{CO_2}	Y_{H_2}	Y_{N_2}
Jet-BGV	0,1263	0,1714	0,0356	0,6667
Jet-BGM	0,1154	0,1932	0,0351	0,6563
Jet-BGP	0,1023	0,2195	0,0344	0,6438

Le tableau 3.7 quant à lui présente les fractions pour les mêmes Biogaz dans le cas de la flamme pilote Sandia D. Le combustible composé de 25% de fuel et de 75% d'air forme le jet de combustible interne d'un diamètre de $D = 7,2$ mm. La flamme est stabilisée à l'aide d'une veilleuse de diamètre $D_p = 18,2$ mm. Le pilote a une composition correspondant à celle d'un mélange carburé brûlé.

Tableau 3.7 – *Composition en fraction massique des combustibles des flammes pilotes de Biogaz.*

	Y_{CH_4}	Y_{CO_2}	Y_{O_2}	Y_{N_2}
Pilote-BGV	0,0958	0,1303	0,1803	0,5936
Pilote-BGM	0,0879	0,1474	0,1782	0,5865
Pilote-BGP	0,0782	0,1682	0,1756	0,5780

Simulation de la combustion des biogaz dans les dispositifs "DLR-A" et "Sandia-D"

Les contours de températures présentés aux figures 3.70, 3.71 et 3.72, permettent de faire des comparaisons entre la structures des flammes de méthane pur et de biogaz dans les flammes D et DLR-A avec le modèle EDC et couplé au mécanisme GRI 3.0 d'une part et DRG multi-étape d'autre part. L'un des constats que l'on peut faire est que la longueur des flammes diminue avec la proportion de méthane dans le mélange du combustible. Les valeurs maximales de températures décroissent également avec le méthane. Ceci démontre que le CH_4 diffuse plus et est plus exothermique que le CO_2 . Le décollement des flammes de biogaz près de la sortie du brûleur se révèle plus élevé que celui du méthane. Le mécanisme du DRG se montre capable de simuler les biogaz de manière efficace avec une précision proche de celle du mécanisme complet du GRI.

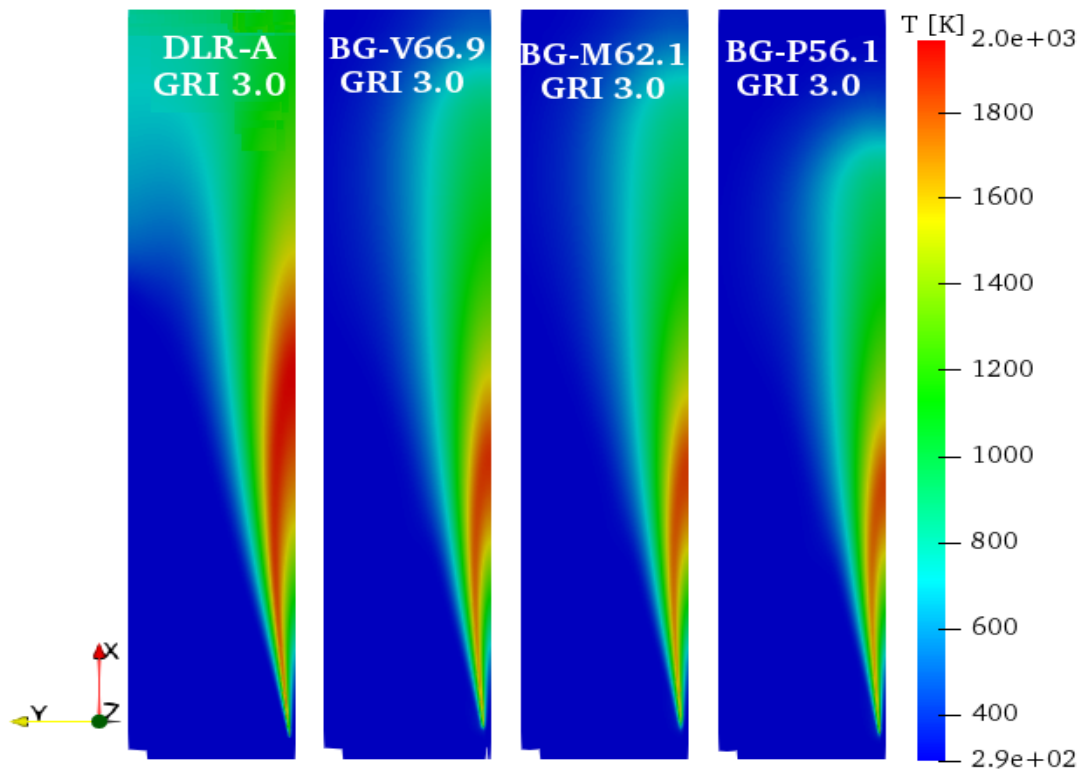


FIGURE 3.70 – Contours de températures calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

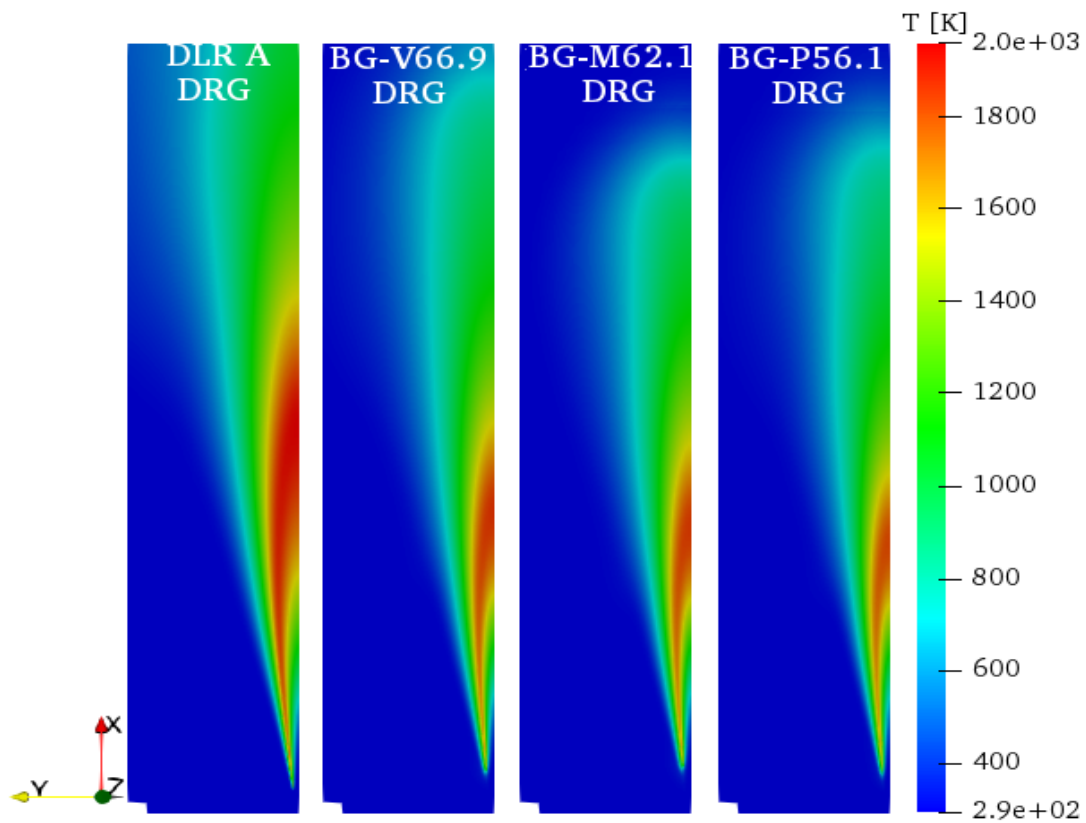


FIGURE 3.71 – Contours de températures calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme squelettique de la DRG, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

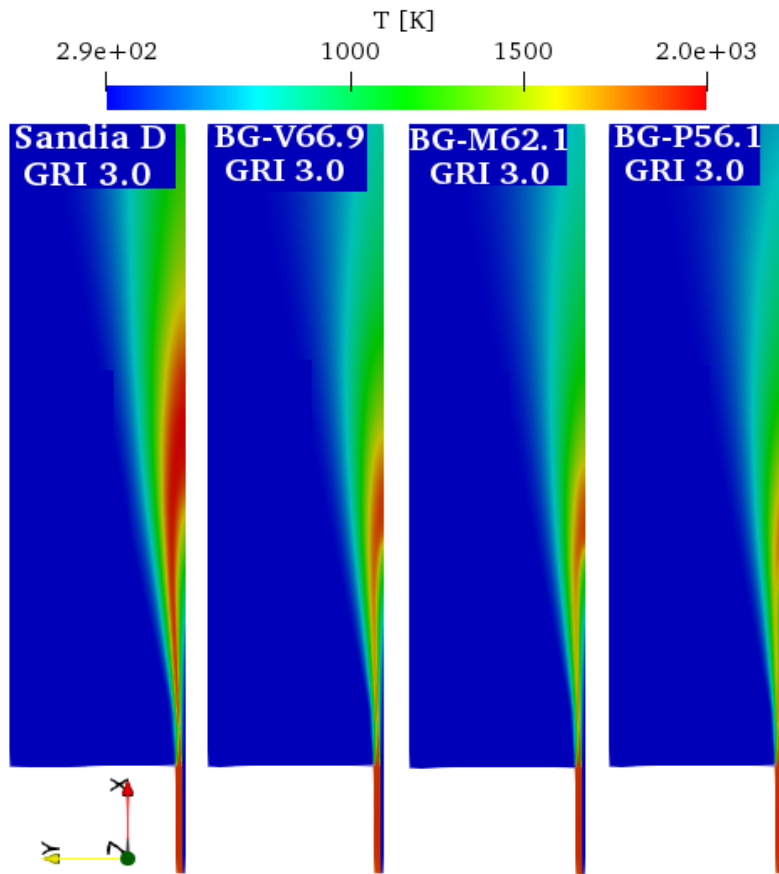


FIGURE 3.72 – Contours de températures calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

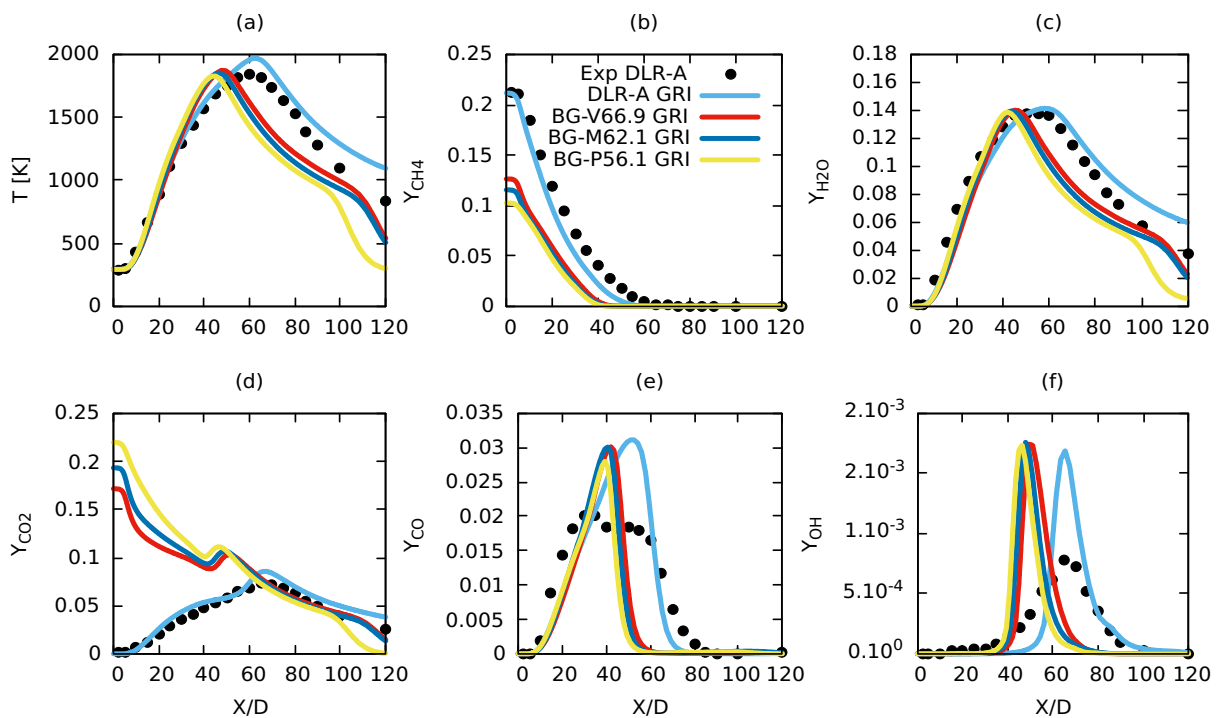


FIGURE 3.73 – Profils axiaux de température, des espèces CH_4 , H_2O , CO_2 , CO et OH calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

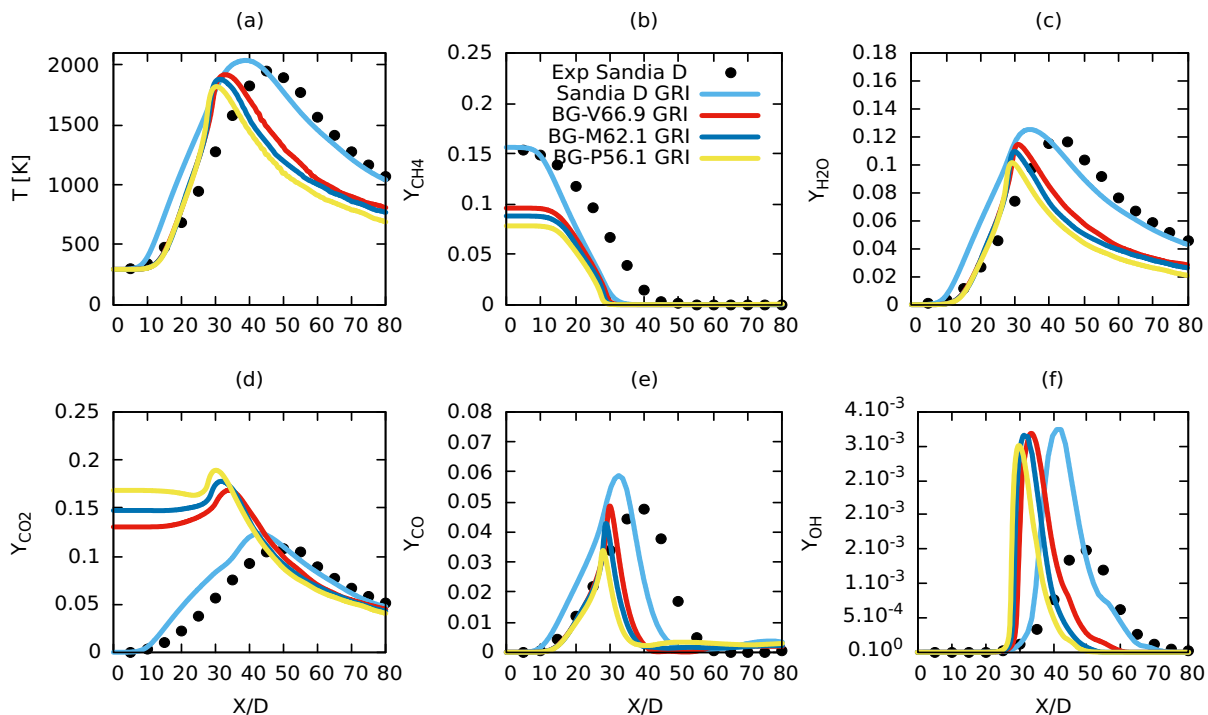


FIGURE 3.74 – Profils axiaux de température, des espèces CH_4 , H_2O , CO_2 , CO et OH calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme GRI 3.0, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

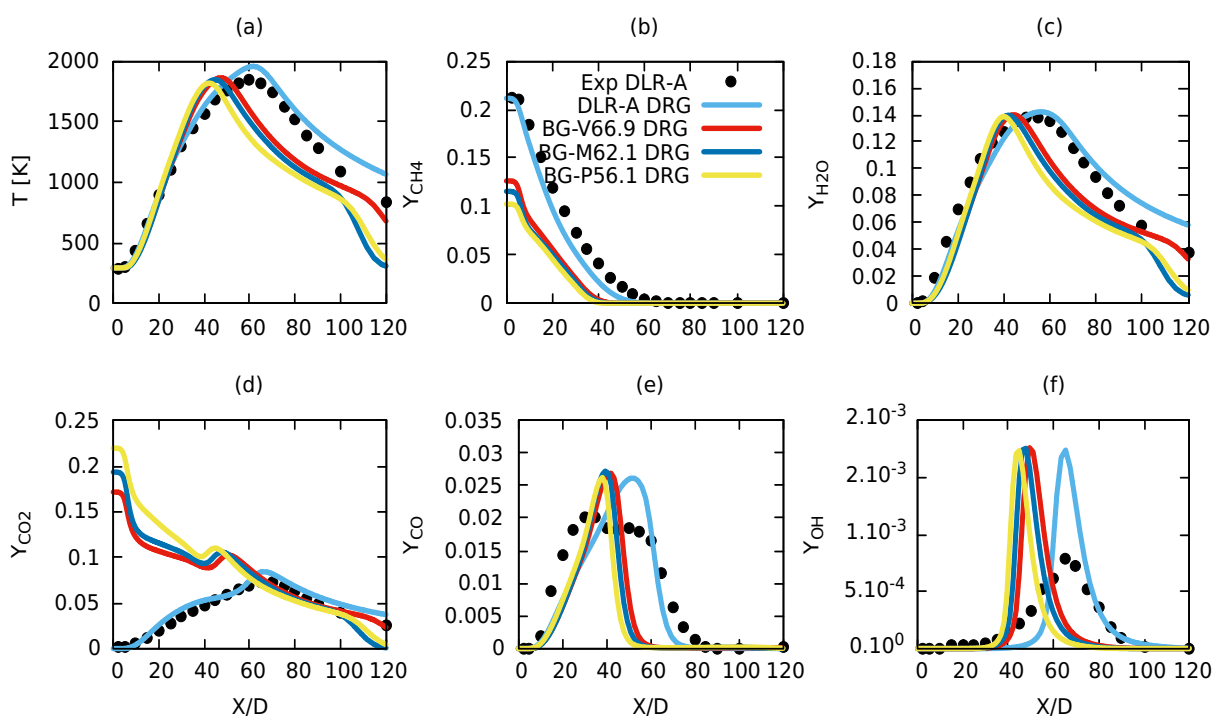


FIGURE 3.75 – Profils axiaux de température, des espèces CH_4 , H_2O , CO_2 , CO et OH calculés à l'aide du modèle EDC, couplé au mécanisme squelettique de la DRG, dans la configuration de la "DLR-A" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

Au regard de ces résultats, la première observation est que les simulations effectuées avec le modèle de mécanismes réduits sont en accord avec celles du GRI 3.0. Le modèle DRG-multi-étape se révèle donc comme étant capable de reproduire avec une bonne précision le processus chimique du mécanisme GRI 3.0 dans la modélisation compacte d'une flamme, puisque les mécanismes conçus par cette méthode sont taillés aux caractéristiques de la flamme.

La propriété des flammes est déterminée en terme de variations de pourcentage des constituants du combustible. La comparaison des performances de combustion des deux gaz a révélé que, malgré la présence d'un taux de méthane beaucoup plus faible et donc d'un pouvoir calorifique inférieur (PCI) plus faible, pour le biogaz de composition spécifique permet néanmoins d'obtenir des combustions comparables à celle du méthane pur. Les simulations dans les configurations montrent les mêmes tendances. Les températures de la combustion des biogaz sont de toute évidence inférieures à celle du méthane, mais les différences ne sont pas très significatives. Dans la configuration de la flamme à jet simple DLR-A par exemple, les caractéristiques des flammes de biogaz à une dilution variable du CO_2 dans le CH_4 ont été étudiées. Les figures 3.73 et 3.75 montrent les profils axiaux de la température et des différents espèces majoritaires produites des flammes avec différents pourcentages de dilution du CO_2 . Comme prévu, la température maximale de la flamme diminue lorsque la dilution du CO_2 augmente. La température maximale pour le biogaz avec 33,1%, 37,9% et 43,9% de CO_2 est de 1890K, 1860K et 1850K respectivement pour les flammes Jet-BGV, Jet-BGM et Jet-BGP ; par rapport à celle de la DLR-A qui est 1980 K. La hauteur de la flamme est mesurée comme la distance axiale entre les entrées du brûleur et la température la plus élevée dans la région en aval. Comme observé sur les figures, il y a une réduction progressive de la longueur de la flamme lorsque la proportion de CH_4 diminue. La diminution de la température la plus élevée dans les flammes à biogaz par rapport au DLR-A, dans la région aval indique la réduction de la hauteur de la flamme. La température la plus élevée dans la région aval, comme on peut le voir dans le tracé de la température radiale, se produit pour une composition de 33,1% de CO_2 de biogaz. En revanche, dans le cas d'une composition de 37,9% et 43,9% de CO_2 , la région où la température est la plus élevée se trouve à proximité de la zone de leurs pics. L'explication de ce phénomène est liée à la compréhension de la composition chimique du combustible. Au fur et à mesure que la dilution du CO_2 augmente, la composante de combustion du combustible diminue, ce qui entraîne une réduction du temps de séjour, du temps de mélange et de la vitesse de réaction, et donc une forte réduction de la température et de la longueur de la flamme. En conséquence, une augmentation supplémentaire de la dilution du CO_2 entraîne un raccourcissement et une extinction de la flamme. La même observation peut être faite dans la configuration de la flamme pilote "Sandia D".

Les simulations faites avec le GRI 3.0 montrent que l'émission de CO est plus élevée avec le méthane qu'avec le biogaz, tandis qu'avec le DRG, c'est le contraire. Cependant, le modèle DRG cible mieux la prédiction du CO, car dans la flamme DLR-A, elle est plus proche de l'expérimentale que pour la prédiction du GRI. On peut donc considérer que les biogaz émettent plus de CO que le méthane au cours de la combustion. En outre l'augmentation des émissions de CO est compensée par des émissions de NO plus faibles. Par conséquent, le biogaz peut être utilisé comme combustible de substitution dans les chambres de combustion industrielle. des méthodes pour augmenter la performance thermique du biogaz par rapport au gaz naturel doivent être entreprises tout en travaillant également sur les méthodes de réduction des émissions de CO.

Les effets du CO_2 sur les propriétés de la flamme de biogaz à des différents taux de dissipation ($\chi = 10, 30$ et 150 s^{-1}) sont résumés sur les figures 3.76 à 3.79. Les conditions aux limites sont celles de la flamme D de Sandia avec modification de la composition du combustible. La pression ambiante considérée est de 1 atm. Le modèle de combustion SLFM utilisé dans cantera a permis de générer les tables de flammelette conduisant aux résultats dans l'espace de la fraction de mélange. Comme précédemment, le méthane suivant sa proportion est substitué par le biogaz issu de la bouse de vache (66,9% de CH_4 et 33,1% de CO_2). La simulation de la combustion avec le méthane pur et le biogaz est faite à l'aide du GRI 3.0. Dans le cas du biogaz, le mécanisme GRI 3.0 est comparé au mécanisme C_2 du DRG. Comme précédemment, la comparaison entre le mécanisme détaillé et le mécanisme réduit par diffusion différentielle du DRG est globalement satisfaisante.

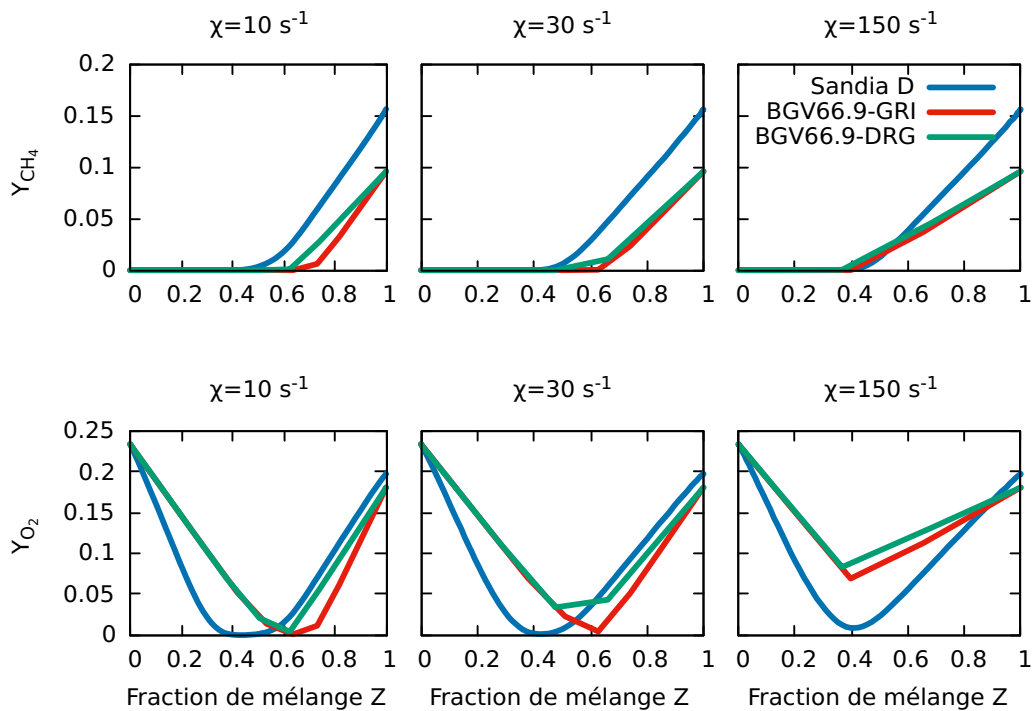


FIGURE 3.76 – Profils du CH_4 et du O_2 dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

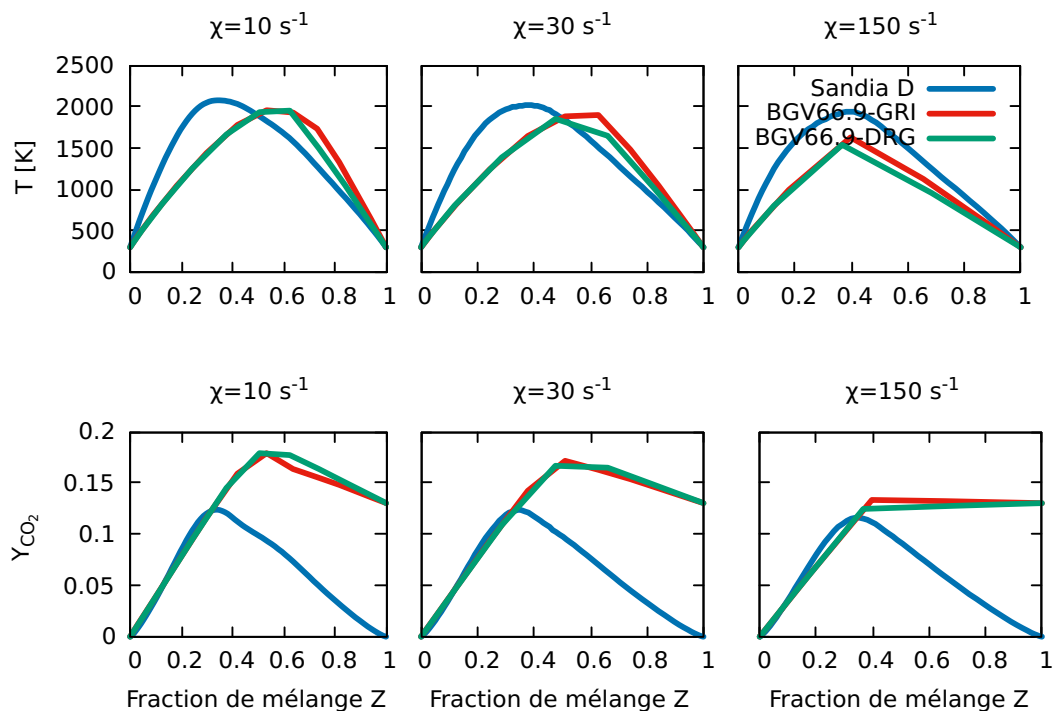


FIGURE 3.77 – Profils de la température et CO_2 dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

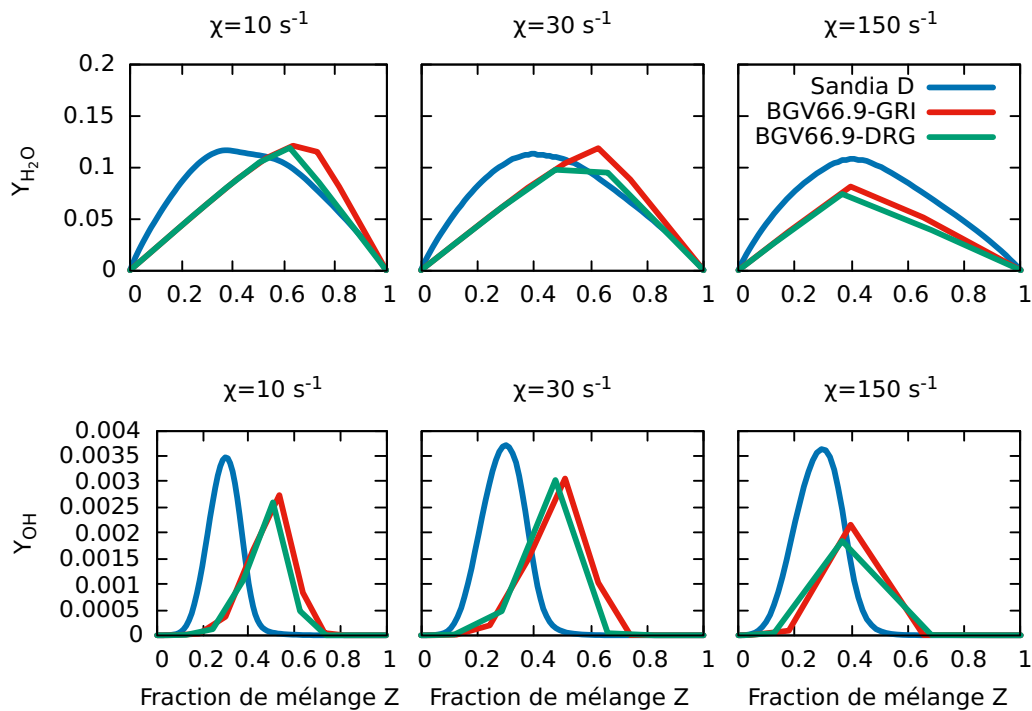


FIGURE 3.78 – Profils du H_2O et du OH dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

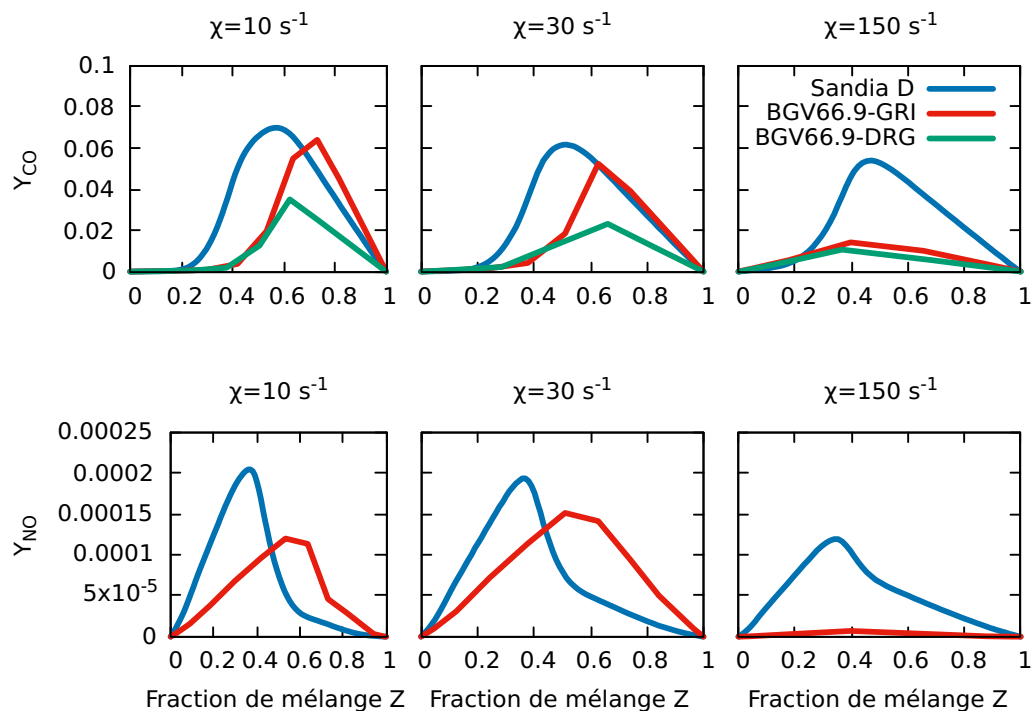


FIGURE 3.79 – Profils du CO et du NO dans l'espace du taux de dissipation (χ) et de la fraction de mélange (Z) calculés à l'aide du modèle SLFM, couplé au mécanisme GRI 3.0, et DRG, dans la configuration de la "Sandia-D" pour les biogaz ci-dessus mentionnés.

Le gaz au méthane dilué est celui dont la proportion en CO_2 est le plus faible des trois biogaz choisis précédemment. Les effets du gaz de dilution sur les caractéristiques de combustion du biogaz sont étudiés dans l'espace de la fraction de mélange et du taux de dissipation. Les effets de la composition sur consommation et la production du CH_4 , O_2 , CO_2 et H_2O . Ces effets sont également observés sur le radical OH et les émissions des

polluants NO et CO. Dans le biogaz dont la fraction de CO_2 est de 33,1% dans les mélanges stœchiométriques, la vitesse de combustion est réduite par rapport de celle du méthane pur. Ce qui entraîne une diminution de la température maximale. À des taux de dissipation scalaire élevés, la structure de la flamme est principalement caractérisée par une température adiabatique plus faible. L'extinction de la flamme se produit en raison de la perte de chaleur par conduction normale à la surface de la flamme et aux réactions chimiques incomplètes (temps de résidence court) dans la région de stabilisation de la flamme. La perte de chaleur par rayonnement dépend principalement du volume de la flamme, qui est inversement proportionnel à la demi-puissance du taux de déformation [139]. Par conséquent, la différence de température maximale de la flamme avec et sans rayonnement devient faible à un taux de déformation élevé et avec de petits volumes de CO_2 ajouté. Les températures maximales de la flamme augmentent donc plus avec les biogaz enrichis en CH_4 .

La présence du CO_2 modifie la stœchiométrie de la flamme et déplace les profils des températures et des espèces dans la direction du côté du combustible. Ceci est dû à la faible diffusivité et à la lourdeur du CO_2 . L'augmentation du CO_2 dans le biogaz induit une réduction des maxima de température de flamme, des fractions massiques de OH, de CO et de NO (figures 3.78 et 3.79). Il y a également réduction du H_2O mais beaucoup plus lorsqu'on évolue vers les taux de dissipation élevés. Ils est constaté au vu de ces résultats que : (i) Le radical OH connu comme l'un des principaux porteurs de chaîne qui décomposent le CH_4 faiblement produit dans le biogaz influence la combustion, (ii) les flammes de biogaz riches en CO_2 produisent moins de polluants (CO et NO) en raison des températures de flamme moins élevées par rapport aux flammes de gaz naturel. En outre, l'ajout d'hydrogène dans le biogaz serait une solution pour améliorer l'augmentation des températures et induire un déplacement des profils de propagation de la température et des espèces concernées vers le côté air. Ce qui serait dû à l'amélioration du mélange avec l'ajout du H_2 . Il a été montré par [186] que la flamme devient plus résistante au taux de déformation avec le mélange d'hydrogène induisant ainsi une augmentation de la température adiabatique de la flamme. Une autre solution pour favoriser l'augmentation des températures serait de procéder à l'optimisation du système de combustion. Ceci peut être fait en variant soit les vitesses d'injection des gaz, soit les dimensions des diamètres d'entrée car la température maximale dépend du nombre de Reynolds.

Conclusion

Ce chapitre consacré aux principaux résultats suivis de quelques analyses a permis de présenter en premier lieu, les mécanismes squelettiques obtenus de la méthode de réduction développée et employée dans cette thèse. Ces mécanismes présentent des similitudes avec le mécanisme détaillé lors des tests effectués dans une configuration laminaire. Dans trois flammes expérimentales, de configurations turbulentes (la flamme DLR-A, la flamme D de Sandia et la flamme OxyFLAM 2 de l'IRFR), ces mécanismes montrent également leur efficacité à reproduire les phénomènes de turbulence et de chimie qui y sont présents. Néanmoins, quelques disparités avec les données expérimentales sont relevées et analysées. En remplaçant le méthane dans la flamme DLR-A et dans la flamme D de Sandia par les biogaz issus des lisiers de vache, mouton et porc, les simulations avec les mécanismes précédemment obtenus ont permis de faire des comparaisons entre les deux types de combustibles. Les résultats de ces substitutions ont montré globalement que le biogaz peut-être une véritable alternative au gaz naturel.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale

Cette thèse est consacrée à l'amélioration et à l'application des méthodes de réduction de la cinétique chimique, visant à optimiser les temps de calculs numériques de la combustion turbulente du méthane, substitué ensuite par le biogaz dans le code OpenFOAM. Elle nous présente en général des résultats prometteurs. La méthode multi-étape développée, s'est montrée capable de réduire de manière significative le nombre de réactions élémentaires du mécanisme détaillé GRI 3.0. Les mécanismes squelettiques, dérivés du mécanisme détaillé GRI 3.0, ont montré leurs capacités à reproduire les mêmes caractéristiques que le mécanisme initial. Dans différentes configurations, les simulations faites avec les mécanismes squelettiques sont en général en bon accord avec les valeurs expérimentales ; nonobstant quelques disparités. En plus, ils ont démontré une excellente capacité à faire des gains en temps de calculs. La modélisation de la combustion est faite par les modèles EDC, PaSR et SLFM, couplant la chimie et turbulence. Ils ont montré de très bonnes capacités à reproduire les résultats expérimentales avec chacun son avantage et son inconvénient. Le modèle EDC a donné en général de meilleur tendance dans l'espace physique, bien qu'étant plus exigeant en temps de calcul. En outre, le modèle SLFM a reproduit des bons profils dans l'espace de la fraction de mélange (Z) et du taux de dissipation du scalaire (χ). La turbulence et le rayonnement, sont modélisés respectivement par les modèles $k - \varepsilon$ et $P-1$. La méthode de réduction développée dans ce travail a permis de générer les mécanismes de combustion des biogaz constitués de méthane (CH_4) et dioxyde de carbone (CO_2) à différentes proportions selon le type de matière organique animale utilisée. Les simulations de ces biogaz dans les chambres de combustion expérimentale se sont avérées capables de produire des températures proches de celles du méthane tout en émettant moins de polluants. Ce travail s'inscrit ainsi dans une analyse comparative des performances de combustion du gaz naturel (traditionnel) et du biogaz (carburant alternatif) dans une chambre de combustion à gaz à écoulement tourbillonnaire, afin d'évaluer la faisabilité de l'utilisation du biogaz dans les chambres de combustion à gaz industrielles. Les résultats révèlent qu'en dépit d'une teneur en méthane (CH_4) beaucoup plus faible et donc d'un pouvoir calorifique plus bas, le biogaz d'une composition spécifique donne une performance de combustion comparable à celle du gaz naturel avec une émission de NO_x et d'autres polluants plus faibles. Ainsi, d'autres travaux pour améliorer la production des biogaz et les modèles de combustion mieux appropriés nécessitent d'être développés.

Cette thèse pourrait constituer pour les pays en voie de développement comme le Cameroun, un outil d'information et de réflexion. Il pourrait permettre au pouvoir public d'évaluer le biogaz comme substitut aux énergies fossiles (gaz naturel). Par exemple, pour compenser le déficit en énergie électrique, les projets d'envergures tels que la centrale à gaz de Kribi (fonctionnant actuellement au gaz naturel), d'une capacité de 216MW, peuvent être envisagés avec du biogaz. Ceci étant donné que son potentiel de production de biogaz au Cameroun est assez considérable.

Perspectives

Faisant suite à ce travail, dans le but d'y apporter des améliorations, plusieurs études méritent d'être poursuivies dans les travaux futurs ; à savoir :

- Une amélioration de la méthode de réduction plus optimale grâce à l'algorithme génétique et les réseaux de neurone dont les principes de modélisation sont bien développés et plus précis. En ce sens, l'exploration ou le couplage avec d'autres méthodes de réduction (CSP, RCCE, REDIM, ...) n'est pas exclu.
- Une amélioration des modèles de combustion est aussi envisagée. Par exemples : (i) en procédant à une hybridation du modèle SLFM avec le Modèle Intermittent Lagrangien (MIL) pour la prise en compte des délais d'ignition, (ii) en introduisant dans les flammelettes les effets de déformation et de perte de chaleur, tout en faisant varier le taux de déformation du point de stagnation et la température de combustion, tel que proposé par Tang et Raman [187].
- Une optimisation de la combustion des biogaz par variation du diamètre de sortie du brûleur et des vitesses d'entrée du combustible ce qui modifiera le nombre de Reynolds tout en améliorant les températures produites. Une application de la combustion des biogaz dans la configuration d'un four industriel ou d'une centrale thermique à gaz est également envisagée dans nos futures travaux.

Références bibliographiques

- [1] Programme des Nations Unies pour le développement (PNUD), (2020), *"Le Rapport sur le développement humain 2020"*, UN Plaza, New York, NY 10017 États-Unis.
- [2] Bergmann V., Meir W., Wolff D., and Stricker W., (1998), *"Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame,"* Appl. Phys. B : Laser Opt., 66(4), pp. 489-502.
- [3] Meier W., Barlow R. S., Chen, Y.L., and Chen, J.-Y., (2000), *"Raman/Rayleigh/ LIF Measurements in a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame : Experimental Techniques and Turbulence-Chemistry Interaction,"* Combust. Flame, 123(3), pp. 326-343.
- [4] Pitsch, H., 2000, *"Unsteady Flamelet Modeling of Differential Diffusion in Turbulent Jet Diffusion Flames,"* Combust. Flame, 123(3), pp. 358-374.
- [5] M.D. Emami, A. Eshghinejad Fard, 2012, *"Laminar flamelet modeling of a turbulent CH₄/H₂/N₂ jet diffusion flame using artificial neural networks,"* Applied Mathematical Modelling, 36(5), pp. 2082–2093.
- [6] Chatzopoulos A.K., and Rigopoulos S., (2013), *"A chemistry tabulation approach via Rate-Controlled Constrained Equilibrium (RCCE) and Artificial Neural Networks (ANNs), with application to turbulent non-premixed CH₄/H₂/N₂ flames,"* Proceedings of the Combustion Institute 34, pp. 1465-1473.
- [7] Hong S., Lee W., Kang S., and Song H.H., (2015), *"Analysis of turbulent diffusion flames with a hybrid fuel of methane and hydrogen in high pressure and temperature conditions using LES approach,"* int. j. of hydrogen energy, 40, 12034-12046.
- [8] Awakem, D., Obounou, M., and Noume, H.C., (2018), *"Application of the CSP Method to a Turbulent Diffusion CH₄/H₂/N₂ Flame Using OpenFoam,"* ASME J. Energy Resour. Technol., 141(4), p. 042201.
- [9] Noume H.C., Bomba V. and Obounou M., (2019), *"Numerical investigation of a turbulent jet flame with a compact skeletal mechanism,"* ASME J. Energy Resour. Technol., 142(3), p. 032206 <https://doi.org/10.1115/1.404455>.
- [10] Gnentedem C., Awakem D., Obounou M., Ekobena Fouda H. P. and Njomo D., (2020), *"Application of a Reduced Mechanism by Computational Singular Perturbation Method to the Calculation of the Ignition Delays of a Turbulence Diffusion Flame CH₄/H₂/N₂,"* ASME J. Energy Resour. Technol., 142, p. 062302.
- [11] Noume H.C., Bomba V., Obounou M., Fouda H.E., Sapnken F.E., (2021), *"Computational Fluid Dynamics Study of a Nonpremixed Turbulent Flame Using openfoam : Effect of Chemical Mechanisms and Turbulence Models,"* ASME J. Energy Resour. Technol., 143(11), p. 112303. <https://doi.org/10.1115/1.4049740>
- [12] Yin C., (2017), *"Prediction of air-fuel and oxy-fuel combustion through a generic gas radiation property model,"* Applied Energy, 189, pp. 449-459.
- [13] Wollny P., Rogg B. and Kempf A., (2018), *"Modelling heat loss effects in high temperature oxy-fuel flames with an efficient and robust non-premixed flamelet approach,"* Fuel, 216, pp. 44-52 <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.11.127>.

- [14] Fordoei E.E. and Mazaheri K., (2019), "Numerical study of chemical kinetics and radiation heat transfer characteristics on the temperature distribution in the oxy-fuel combustion," *Heat and Mass Transfer*, 55, pp. 2025-2036.
- [15] Barlow R.S., Frank J.H., (1998), "Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames," *Proc. Combust. Inst.*, 27, pp. 1087-1095.
- [16] Schneider C., Dreizler A. A., Janicka J., and Hassel E.P., (2003), "Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames," *Combust and Flame*, 135, pp. 185-190. DOI : 10.1016/s0010-2180(03)00150-0
- [17] Müller H., Ferraro F. and Pfitzner M., (2013), "Implementation of a Steady Laminar Flamelet Model for non-premixed combustion in LES and RANS simulations," 8th International OpenFOAM Workshop. Jun 11-14. Jeju, Korea.
- [18] Jaravel T, Riber E., Cuenot B., Pepiot P., (2018), "Prediction of flame structure and pollutant formation of Sandia flame D using Large Eddy Simulation with direct integration of chemical kinetics," *Combustion and Flame*, 188, 180-198.
- [19] Goussis D.A. and Maas U., (2011), "Model Reduction for Combustion Chemistry," *Turbulent Combustion Modeling*, Chapter 9, DOI 10.1007/978-94-007-0412-1_9.
- [20] Goussis D.A., (2012), "Quasi steady state and partial equilibrium approximations : their relation and their validity," *Combustion Theory and Modelling*, 16 :5, 869-926, DOI : 10.1080/13647830.2012.680502
- [21] Lam S.H., (1985), "Singular Perturbation for stiff equations using numerical methods," *Recent Advances in the Aerospace Sciences*, Corrado Casci, Ed., Plenum Press, New York and London, pp. 3-20.
- [22] Lam S.H. and Goussis D.A., (1991) "Conventional asymptotics and Computational Singular Perturbation for simplified kinetics modeling," *Lecture Notes in Physics 384*, Ed., Springer-Verlag, Chapter 10.
- [23] Lam S.H. and Goussis D.A., (1994), "The CSP method for simplifying kinetics," *International Journal of Chemical Kinetics*, 26 :461-486.
- [24] Lam S.H., Goussis D.A., (1989), *Understanding complex chemical kinetics with computational singular perturbation*, Symposium (International) on Combustion 22(1) 931-941.
- [25] Minuzzi F., Yu C., and Maas U., (2019), "Simulation of methane/air non-premixed turbulent flames based on REDIM simplified chemistry," *Flow, Turbulence and Combustion*, 103, pp. 963-984.
- [26] Yu C., Minuzzi F., and Maas U., (2020), "REDIM reduced chemistry for the simulation of counterflow diffusion flames with oscillating strain rates," *Combustion Theory and Modelling*, 24(4), pp. 682-704. <https://doi.org/10.1080/13647830.2020.1739336>
- [27] Maas U. and Pope S.B., (1992), "Simplifying Chemical Kinetics : Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space," *Combustion and Flame*, 88 : 239-264.
- [28] Gicquel O., and Th'evenin D., (1992), "Implementation of simplified chemical kinetics based on Intrinsic Low-Dimensional Manifolds," *Proc. of the 24th International Symposium on Combustion*, pp. 2103-112.
- [29] Elbahloul S., Rigopoulos S., (2015), "Rate-Controlled Constrained Equilibrium (RCCE) simulations of turbulent partially premixed flames (Sandia D/E/F) and comparison with detailed chemistry," *Combustion and Flame*, 162, pp. 2256-2271.
- [30] Yu, G., Hadi, F., and Metghalchi, H., 2018, "Rate-Controlled Constrained-Equilibrium Application in Shock Tube Ignition Delay Time Simulation," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, 141(2), p. 020801.
- [31] Du, L., Yu, G., Wang, Z., and Metghalchi, H., (2019), "The Rate-Controlled Constrained-Equilibrium Combustion Modeling of N-Pentane/Oxygen/Diluent Mixtures," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, 141(8), p. 082206.

- [32] Lu T., (2004), *"Comprehensive reduction and application of chemical reaction mechanisms,"* Dissertation, Princeton University, Princeton.
- [33] Lu T.F. and Law C.K., (2005), *"A directed relation graph method for mechanism reduction,"* Proceedings of the Combustion Institute, 30 : 1333-1341, doi : 10.1016/j.proci.2004.08.145.
- [34] Lu T.F. and Law C.K., (2006), *"Linear time reduction of large kinetic mechanisms with directed relation graph : n-Heptane and iso-octane,"* Combustion and Flame, 144 :1-2 24-36, doi :10.1016/j.combustflame.2005.02.015.
- [35] Lu T. and Law C. K., (2008) *"A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species : A reduced mechanism for methane oxidation with no chemistry. Combustion and Flame,"* 154(4), 761-774.
- [36] Zheng X.L., Lu T. F., and Law C.K., (2007), *"Experimental counterflow ignition temperatures and reaction mechanisms of 1,3-butadiene,"* Proceedings of the Combustion Institute, 31(1), 367-375.
- [37] Bendtsen A., Glarborg P., and Dam-Johansen K., (2001), *"Visualization methods in analysis of detailed chemical kinetics modelling. Computers and Chemistry,"* 25 :2 161-170.
- [38] Pepiot-Desjardins P., and Pitsch H., (2008), *An "efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. Combustion and Flame,"* 154 :1-2 67-81, doi :10.1016/j.combustflame.2007.10.020.
- [39] Sun W., Chen Z., Gou X., and Ju Y., (2010), *"A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms,"* Combustion and Flame, 157 :7 1298-1307, doi : 10.1016/j.combustflame.2010.03.006.
- [40] Luo Z., Lu T.F., M.J. Maciaszek, Som S.K., and Longman D.E., (2010), *"A Reduced Mechanism for High-Temperature Oxidation of Biodiesel Surrogates,"* Energy & Fuels, 24 :12 6283-6293. doi : 10.1021/ef1012227.
- [41] Niemeyer K.E., (2014), *"Reducing The Cost of Chemistry in Reactive-Flow Simulations : Novel Mechanism Reduction Strategies and Acceleration Via Graphics Processing Units,"* Doctoral Thesis, Case Western Reserve University.
- [42] Xi S., Xue J., Wang F. and Li X., (2020), *"Reduction of large-size combustion mechanisms of n-decane and n-dodecane with an improved sensitivity analysis method,"* Combust. and Flame 222, pp. 326-335.
- [43] Pei Y., Mehl M., Liu W., Lu T., Pitz W.J. and Som S., (2015), *"A Multicomponent Blend as a Diesel Fuel Surrogate for Compression Ignition Engine Applications,"* Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 137,
- [44] Minuzzi F.C., Bublitz C. and De Bortoli A. L., (2017), *"Development of a reduced mechanism for ethanol using directed relation graph and sensitivity analysis,"* Journal of Mathematical Chemistry, 55, pp. 1342-1359.
- [45] Niemeyer K.E., Sung C.J., and Raju M.P., (2010), *"Skeletal mechanism generation for surrogate fuels using directed relation graph with error propagation and sensitivity analysis,"* Combustion and Flame, 157 :9 1760-1770. doi : 10.1016/j.combustflame.2009.12.022.
- [46] Zsély I.G., Nagy T., Simmie J.M., and Curran H.J., (2009), *"Reduction of a Detailed Kinetic Model for the Ignition of Natural Gas Mixtures at Gas Turbine Conditions,"* In : 4th European Combustion Meeting. 810045. Vienna, Austria.
- [47] Bomba, V., (2017), *"Chemistry Reduction for Laminar Oxyfuel combustion,"* Ph.D. thesis, Ruhr University Bochum, Bremen, Germany.
- [48] Mouangue, R., (2011), *"Contribution à la modélisation de la combustion turbulente non-prémélangée avec prise en compte de l'auto-allumage".* Thèse de Doctorat, Université de Yaoundé I, Cameroun.

- [49] Guillaume A., (2009), "*Simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs non prémélangés*". Thèse de Doctorat, Université de Toulouse, France.
- [50] Coron X., (2006), "*Etude expérimentale d'une flamme de prémélange stabilisée dans un écoulement turbulent à point d'arrêt*". Thèse de Doctorat, Université de Poitiers, France.
- [51] Robin V., (2007), "*Contribution à la modélisation des écoulements turbulents réactifs partiellement prémélangés*". Thèse de Doctorat, École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, France.
- [52] O. Manna, Pierre Brequigny, Christine Mounaïm-Rousselle, Fabrice Foucher, S.H. Chung, W.L. Roberts, (2018), "*Turbulent burning characteristics of FACE-C gasoline and TPRF blend associated with the same RON at elevated pressures*", *Experimental Thermal and Fluid Science*, vol.95, pp. 104-114.
- [53] Noui S., (2006), *Etude numérique de la combustion des gaz dans un four de cimenterie*. Thèse de magistère, Faculté des sciences exactes département de physique, Université de Batna.
- [54] Fichet V., (2008), *Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée*. Thèse de Doctorat, École Centrale Paris, France.
- [55] Thierry Poinsot, Denis Veynante., (2005), "*Theoretical and numerical combustion*". R.T. Edwards Inc., pp.522.
- [56] Leroy V., (2007), *Contribution à la modélisation des feux de forêt : Cinétique de dégradation thermique et Cinétique de combustion des végétaux*. Thèse de Doctorat, Université de Corse, France.
- [57] Burke, S. P., and Schumann, T. E. W., (1928) "*Diffusion Flames,*" *Indust. Eng. Chem.*, Vol. 20, pp. 998-1004.
- [58] Moule Y., (2013) "*Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Super-statoréacteurs*". PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers, France.
- [59] Kim T., Ahn M., Lim D., and Yoon Y., (2019), "*Velocity and mass diffusivity effects on the linear and nonlinear phenomena of the Burke–Schumann flame with acoustic excitation,*" *Journal of Mechanical Science and Technology* 33 (6) pp. 3019-3029
- [60] Nayagam V., Dietrich D.L. and Williams F. A., (2017), "*A Burke-Schumann analysis of diffusion-flame structures supported by a burning droplet*", *Combustion Theory and Modelling*, DOI : 10.1080/13647830.2017.1280182.
- [61] Warnatz, J., Mass, U., and Dibble, R. (1999), "*Combustion*". Springer Verlag.
- [62] Mao, K. and Toor, H. L. (1970). "*A diffusion model for reaction with turbulent mixing,*" *AIChE Journal*, 16(1) pp. 49-52.
- [63] Borghi R., (1988), "*Turbulent combustion modeling,*" *Progress in Energy and Combustion Science*, 14 pp. 245-292.
- [64] Magnussen B.F. and Hjertager B. H., (1976), "*On mathematically modeling with special emphasis on soot formation and combustion,*" *Proceedings of the Combustion Institute*, 16, pp. 719-729, The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [65] Magnussen B. F., (1981), "*On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reactions in Turbulent Flow*", 19th AIAA Sc. Meeting, St. Louis, USA
- [66] Chomiak J., (1990), "*Combustion A Study in Theory, Fact and Application,*" Abacus Press/Gordon and Breach Science Publishers, New York.
- [67] Ferrarotti M., Li Z. and Parente A., (2019), "*On the role of mixing models in the simulation of MILD combustion using finite-rate chemistry combustion models,*" *Proc. Combust. Inst.*, 37 (4), pp. 4531-4538, 10.1016/j.proci.2018.07.043.

- [68] Iavarone S., Caferio M., Ferrarotti M., Contino F. and Parente A., (2019), "A multiscale combustion model formulation for NOx predictions in hydrogen enriched jet flames", *Int. J. Hydrog. Energy*, 44 (41) pp. 23436-23457, 10.1016/j.ijhydene.2019.07.019.
- [69] Iavarone S., Péquin A., Chen Z. X., Khoa Doan N. A., Swaminathan N. and Parente A., (2020), "An a priori assessment of the Partially Stirred Reactor (PaSR) model for MILD combustion," *Proc. Combust. Inst.*, <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.234>
- [70] Peters N., (1984), "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, 10(3) :319-339.
- [71] Peters N., (2000), "Turbulent Combustion," Cambridge University Press.
- [72] Kundu, P., Ameen, M., Unnikrishnan, U., and Som, S., (2017) "Implementation of a Tabulated Flamelet Model for Compression Ignition Engine Applications," SAE Technical Paper 2017-01-0564, <https://doi.org/10.4271/2017-01-0564>.
- [73] Owoyele O., Kundu P., Ameen M., Echekki T. and Som S., (2019), "Application of deep artificial neural networks to multi-dimensional flamelet libraries and spray flames," *International J of Engine Research* 1-18 <https://doi.org/10.1177/1468087419837770>.
- [74] Pant T., Han C. and Wang H., (2019), "Examination of errors of table integration in flamelet/progress variable modeling of a turbulent non-premixed jet flame," *Applied Mathematical Modelling* (72) 369-384
- [75] Bouheraoua L., (2014), "Simulation aux grandes échelles et modélisation de la combustion supersonique," Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France.
- [76] Obounou M., (1994), "Modélisation de la combustion turbulente non prémélangée avec prise en compte d'une cinétique chimique complexe," Thèse de Doctorat, Université de Rouen, France.
- [77] Villermaux J., (1966), "Micromixing phenomena in stirred reactors", *Encycl. of fluid mechanics*, Gulf Publishing Corp. West Orange (NJ).
- [78] Vervisch L., (1991), "Prise en compte d'effets de cinétique chimique dans les flammes de diffusion turbulentes par l'approche fonction densité de probabilité," Thèse de Doctorat, Université de Rouen, France.
- [79] Borghi R. and Pourbaix E., (1983), "Langrangian models for turbulent combustion", 4th Symp. on turbulent shear flows.
- [80] Borghi R. and Gonzalez M., (1989), "Application of Lagrangian models to turbulent combustion" *Comb. and Flame* , n° 40 Springer-Verlag.
- [81] Fallo L., Gonzalez M., Elamraoui R., Obounou M., (1997) "Modeling Finite-Rate Chemistry in Non Premixed Turbulent Combustion : Test on the Bluff-Body Stabilized Flame," *Comb. and Flame*, 110, 298-314.
- [82] Izard J. F., (2009), "Contribution à la modélisation de la combustion non-prémélangée turbulente dans les écoulements rapides". Thèse de Doctorat de L'Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique, France.
- [83] Yang, B., and Pope, S. B., (1998), "An Investigation of the Accuracy of Manifold Methods and Splitting Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry," *Combust. Flame*, 112(1-2), pp. 16-32.
- [84] Dopazo C., O'Brien E.E., (1974), "A probabilistic approach to the auto-ignition of a reactive turbulent mixtures," *Acta Astronautica*, 1 : 1239.
- [85] Pope, (1985), "PDF methods for turbulent reactive flows", *Prog, Energy Combust. Sci.*, 11 :119-195
- [86] Damien Paulhiac M., (2015), *Modélisation de la combustion d'un Spray dans un bruleur aeronautique*. Thèse de Doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, France.

- [87] Klimenko A.Y., (1990) "*Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow*," Fluid Dynamics, 25(3) :327-334.
- [88] Bilger R.W.,(1993), "*Conditional moment closure for turbulent reacting flow*," Physics of Fluids A : Fluid Dynamics, 5(22) :436-444.
- [89] Klimenko A.Y. and Bilger R. W, (1999), "Conditional moment closure for turbulent combustion," Progress in Energy and Combustion Science 25 (6) 595-687.
- [90] García-Oliver J.M., Novella R., Pastor J.M. and Winklinger J.F., (2014), "*Evaluation of combustion models based on tabulated chemistry and presumed probability density function approach for diesel spray simulation*," int. J. Comput Math., Vol.91, n° .1, 14-23,
- [91] Khodabandeh E., Moghadasi H., Pour M.S., Ersson M., Jönsson P.G., Rosen M.A. and Rahbari A., (2020), "*CFD study of non-premixed swirling burners : Effect of turbulence models*," Chin. J. Chem. Eng, 28(4), pp. 1029-1038.
- [92] Jiang N., Layton W., McLaughlin M., Rong Y., and Zhao H., (2020), "*On the Foundations of Eddy Viscosity Models of Turbulence*," Fluids, 5, 167 ; doi :10.3390/fluids5040167.
- [93] Spalart P.R., and Allmaras S.R., (1994), "*A one-equation turbulence model for aerodynamic flows*," La Recherche Aérospatiale, Vol. 1, pp. 5-21.
- [94] Spalart P.R., and Garbaruk A.V., (2020), "*A Correction to the Spalart-Allmaras Turbulence Model, Providing More Accurate Skin Friction*," AIAA Journal, 58(1) :1-3 DOI : 10.2514/1.J059489.
- [95] Ruia Z., Chaoa Y., Jiana Y., Xinliang L., (2013), "*Improvement of Baldwin–Lomax turbulence model for supersonic complex flows*," Chinese J Aeronaut 26(3), pp. 529-534.
- [96] Jones, W. P., and Launder, B. E., (1972), "*The Prediction of Laminarization With a 2-Equation Model of Turbulence*," Int. J. Heat. Mass. Transfer., 15(2), pp. 301-314.
- [97] Cokljat D., Ivanov V.A., Sarasola F.J., and Vasquez S.A., (2000), "*Multiphase k-epsilon models for unstructured meshes*," In ASME 2000 Fluids Engineering Division Summer Meeting, Boston, MA.
- [98] Shih, T.-H. ; Liou, W.W. ; Shabbir, A. ; Yang, Z. ; Zhu, J, (1995), "*A new $k - \epsilon$ eddy-viscosity model for high Reynolds number turbulent flows-Model development and validation*," Comput. Fluids, 24, 227-238.
- [99] Wilcox, D., (1988), "*Reassessment of the scale determining equation*," AIAA Journal 26(11), 1299-1310.
- [100] Wilcox, (1993), "*Turbulence modeling for CFD*," DCW Industries, Inc., 5354 Palm Drive, La Canada, California 91011.
- [101] Menter, F.R., Langtry, R.B., Likki, S.R. et al., (2006), "*A correlation based transition model using local variables Part 1-Model formulation*," Journal of Turbomachinery 128(3), 413.
- [102] Warsi, Z.U.A., (2005), *Fluid Dynamics : Theoretical and Computational Approaches*, 3rd edn. CRC Press, New York, NY.
- [103] Yilmaz H., Cam O., Tangoz S., Yilmaz I., (2017), "*Effect of different turbulence models on combustion and emission characteristics of hydrogen/air flames*," Int J Hydrogen Energy 42 : 25744-55.
- [104] Miltner M., Jordan C., Harasek M., (2015), "*CFD simulation of straight and slightly swirling turbulent free jets using different RANS-turbulence models*," Appl Therm Eng, 89 :1117-26. [http :// dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.05.048](http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.05.048).
- [105] Smagorinsky J., (1963), "*General circulation experiments with the primitive equations*," Monthly Weather Review, 91(3), 99-164.

- [106] Stefan A., (2014), "*An Approach to the Automatic Generation of Reduced Chemical Mechanisms using Computational Singular Perturbation (CSP) and Rate-Controlled Constrained Equilibrium (RCCE)*," Doctorat Thesis, Imperial College London.
- [107] Luo Z., (2013), "*Development of Reduced Chemical Kinetics for Combustion Simulations with Transportation Fuels*," Doctoral Dissertations. 232, University of Connecticut, <https://opencommons.uconn.edu/dissertations>
- [108] Tomlin A.S., Turányi T, and Pilling M.J., (1997), *Mathematical tools for the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms. In : Low- temperature Combustion and Autoignition.* Ed. by MJ Pilling. Vol. 35. Comprehensive Chemical Kinetics. Elsevier, Amsterdam. Chap. 4, 293-437.
- [109] Lu T. and Law C.K., (2009), "*Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale simulations*," Progress in Energy and Combustion Science, 35 :192-215.
- [110] Turanyi T., Tomlin A.S., (2014), "*Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms*," Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [111] Delaroque A., (2018), "*Elaboration d'un outil numérique pour la réduction et l'optimisation des mécanismes cinétiques pour les systèmes de combustion*," Thèse de Doctorat, Sorbonne Université, France.
- [112] Hairer E. and Wanner G., (1991), *Solving Ordinary Differential Equations II*, Vol. 14 of Springer Series in Computational Mathematics, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg.
- [113] Bodenstein M., (1913), "*Eine Theorie der photochemischen Reaktionsgeschwindigkeiten*," Zeitschrift für Physikalische Chemie 85 : 329-397.
- [114] Keck J. C., Gillespie D., (1971), "*Rate-controlled partial-equilibrium method for treating reacting gas mixtures*," Combustion and Flame 17(2) 237-241.
- [115] Lebranchu A., (2017), "*Etude du procédé de méthanation en digesteur anaérobie à l'échelle pilote. Impact du mélange et du transfert gaz-liquide sur les performances de production de biogaz*," Thèse PhD, Université de Lorraine, France.
- [116] Fougerit, V., (2017), "*Développement d'un procédé innovant d'épuration du biogaz par mise en œuvre de contacteurs à membranes*," These PhD, Université Paris-Saclay, France.
- [117] Gomez D.C., (2013), "*Biogas as an energy option : an overview*," in : The Biogas Handbook. Elsevier, pp. 1-16. <https://doi.org/10.1533/9780857097415.1>
- [118] Deublein, D., Steinhauser, A., (2011), "*Biogas from waste and renewable resources : an introduction, 2nd, and expanded ed ed*," Wiley-VCH, Weinheim.
- [119] Petersson, A., WeLLInGer, A.,(2009), "*Biogas upgrading technologies-developments and innovations*," IEA Bioenergy 20.
- [120] Sigot L., (2014), "*Épuration fine des biogaz en vue d'une valorisation énergétique en pile à combustible de type SOFC-Adsorption de l'octaméthylcyclotétrasiloxane et du sulfure d'hydrogène*," Thèse PhD, INSA, Université de Lyon, France.
- [121] El Bassam, N., Maegaard, P., (2004), "*Renewable Energy Resources and Technologies, in : Integrated Renewable Energy for Rural Communities*," Elsevier, Amsterdam, 5 pp. 71-191.
- [122] Muhajir K., Badrawada I.G., Susastriawan A.A.P., (2019), "*Utilization of biogas for generator set fuel : performance and emission characteristics*," Biomass Conversion and Biorefinery, 9 :695-698 <https://doi.org/10.1007/s13399-018-00369-y>
- [123] Papacz W, (2011), "*Biogas as vehicle fuel*," Journal of KONES Powertrain and Transport, Vol. 18, No. 1. pp. 404-410.

- [124] Sapp M., Harrison M., Hany U., Charlton A., Thwaites R., (2015), "Comparing the effect of digestate and chemical fertiliser on soil bacteria," *Appl. Soil Ecol.* 86 :1-9.
- [125] Fischer M., Jiang X., (2016), "A chemical kinetic modelling study of the combustion of CH₄-CO-H₂-CO₂ fuel mixtures," *Combustion and Flame* 1-20 <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.02.001>.
- [126] Smith G., Golden D., Frenklach M., Moriarty N., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C., Hanson R., Song S., Gardiner W., Lissianski V., Qin Z., GRI-mechanism 3.0, Website, (dernier accès le 28-08-2021), <http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/overview.html>.
- [127] Kazakov A., Frenklach M., DRM mechanism, Website, last access on 24.11.2020, <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
- [128] Heghes C., Karbach V., Warnatz J., (2005), "Evaluation of new data for hydrocarbon kinetics," in : Proceedings of the European Combustion Meeting, 176.
- [129] Fischer M., Jiang X., (2015), "An investigation of the chemical kinetics of biogas combustion," *Fuel* 150 711-720.
- [130] Chen S., Zheng C., (2011), "Counterflow diffusion flame of hydrogen-enriched biogas under MILD oxy-fuel condition," *Int. J. of Hydrogen Energy* 36 pp. 15403-15413 doi :10.1016/j.ijhydene.2011.09.002.
- [131] Colorado A.F., Herrera B.A., Amell A.A., (2010), "Performance of a Flameless combustion furnace using biogas and natural gas," *Bioresource Technology* 101 pp. 2443-2449.
- [132] Li J., Huang H., Huhetaoli, Osaka Y., Bai Y., Kobayashi N. and Chen Y., (2017), "Combustion and Heat Release Characteristics of Biogas under Hydrogen and Oxygen-Enriched Condition", *energies-MDPI*, 10, 1200 ; doi :10.3390/en10081200
- [133] Greco A, Mira D, Jiang X., (2017), "Effects of fuel composition on biogas combustion in premixed laminar flames", The 8th International Conference on Applied Energy-ICAE2016, *Energy Procedia* 105, pp. 1058-1062.
- [134] Liu Y., Chen S., Yang B., Liu K. and Zheng C., (2015) "First and second thermodynamic-law comparison of biogas MILD oxy-fuel combustion moderated by CO₂ or H₂O," *Energy Conversion and Management*, 106, pp. 625-634.
- [135] Nonaka H.O.B., Pereira F.M., (2016), "Experimental and numerical study of CO₂ content effects on the laminar burning velocity of biogas," *Fuel*, 182, pp. 382-390.
- [136] Zhang K. and Jiang X., (2018), "An assessment of fuel variability effect on biogas-hydrogen combustion using uncertainty quantification," *Int. J. of Hydrogen Energy*, <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.04.196>.
- [137] Wei Z.L., Leung C.W., Cheung C.S. and Huang Z.H., (2016), "Effects of equivalence ratio, H₂ and CO₂ addition on the heat release characteristics of premixed laminar biogas-hydrogen flame," *Int. J. of Hydrogen Energy*, 41, pp. 6567-6580 <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.01.170>.
- [138] Mameri A. and Tabet F., (2015), "Numerical investigation of counter-flow diffusion flame of biogasehydrogen blends : Effects of biogas composition, hydrogen enrichment and scalar dissipation rate on flame structure and emissions," *Int. J. of Hydrogen Energy*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.035>.
- [139] Mameri A., Tabet F. and Hadeif A., (2015), "Numerical investigation of biogas diffusion flames characteristics under several operation conditions in counterflow configuration with an emphasis on thermal and chemical effects of CO₂ in the fuel mixture," *Heat Mass Transfer* DOI 10.1007/s00231-017-2017-4.
- [140] Hoda A., Rahman M.R.T., Asrar W., and Khan S.A., (2021), "A Comparative Study of Natural Gas and Biogas Combustion in A Swirling Flow Gas Turbine Combustor," *Combustion Science and Technology*, DOI : 10.1080/00102202.2021.1882441

- [141] Muh E., Tabet F. and Amara S., (2018), "The Future of Biogas Production in Cameroon : Prospects, Challenges and Opportunities", *Current Alternative Energy* 2 pp. 82-101.
- [142] "La production d'électricité d'origine renouvelable : détails par région et par pays", (2013), Quinzième inventaire - Édition 2013.
- [143] IEA, "Cameroon energy balances," 2014. Available : <https://www.iea.org/statistics/statisticssearch/report/?country=CAMEROON&product=balances&year=2014>. [Accédé le : 19-Dec-2020].
- [144] REN21, 2016, "Renewables 2016 Global Status Report", https://www.ren21.net/wp-content/uploads/2019/05/REN21_GSR2016_FullReport_en_11.pdf
- [145] USAID, 2016. "*Cameroon Power Africa Fact Sheet*," <https://2012-2017.usaid.gov/powerafrica/cameroon> [accessed 16 July 2020].
- [146] Ministère de l'Eau et de l'Énergie du Cameroun (Version provisoire mars 2006), "Assistance au Ministère de l'Énergie et de l'Eau dans l'élaboration du Plan de Développement à long terme du Secteur de l'Électricité Horizon 2030 (PDSE 2030)" Rapport Provisoire, Vol 4, Plan de développement production.
- [147] Vintila T., Ionel I., Fregue T. T. R., Wachter A. R., Julean C., and Gabche A. S., (2019), "Biofuels Cameroon biomass : Residual Biomass from Food Processing Industry in Cameroon as Feedstock for Second-generation Biofuels," *BioResources* 14(2), pp. 3731-3745.
- [148] Roopnarain A., and Adeleke R., (2017), "*Current status, hurdles and future prospects of biogas digestion technology in Africa*", *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 67, pp. 1162-1179.
- [149] Muh E., Amara S. and Tabet F., (2018), "*Sustainable energy policies in Cameroon : A holistic overview*," *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82, pp. 3420-3429.
- [150] Afrik21, (2020), "*Cameroon : Hysacam to produce electricity from household waste soon*," <https://www.afrik21.africa/en/cameroon-hysacam-to-produce-electricity-from-household-waste-soon/> (accessed 31 July 2020)
- [151] Ponche J.L. et Canches G., (1988), "Production de biogaz : réalisation d'un biodigesteur opérationnel au Nord Cameroun 1987-1988.," Rapport de travail Biogaz 17/10/2014.
- [152] Kouya-Takala G., Nguimbous-Kouoh J.J., Biyindi T.D. and Manguelle-Dicoum E., (2019), "*Biogas and Digestate Production in a Portable Anaerobic Digester by Methanization*," *Int. J. of Renewable Energy Sources*, 4, pp. 11-25.
- [153] Mameri A., "*Etude numérique de la combustion turbulente du prémélange pauvre méthane/air enrichi à l'hydrogène*". Thèse de Doctorat de l'université d'Orléans, France (2009).
- [154] Nordin, N., (2001), "*Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*," Ph.D. thesis, Department of Thermo and Fluid Dynamics Chalmers, University of Technology, Göteborg.
- [155] Golovitchev, V. I., Nordin, N., Jarnicki, R., and Chomiak, J., (2000), "*3-D Diesel Spray Simulations Using a New Detailed Chemistry Turbulent Combustion Model*," *J. Fuels Lubr., SAE Int.*, 109, pp. 1391-1405, Section 4.
- [156] Byggstøl S., and Magnussen B.F., (1985), "*A Model for Flame Extinction in Turbulent Flow*," *Turbulent Shear Flows* 4, DOI : 10.1007/978-3-642-69996-2_31
- [157] Ertesvg I.S., Byggstøl S. and Magnussen B.F., (1989), "*An 'Eddy-Dissipation' Reynolds-stress turbulence model closed by an equation related to the turbulent transport timescale*," *Symposium on Turbulent Shear Flows*, 7th, Stanford, CA, Aug. 21-23, 1989, Proceedings. Volume 2 (A90-35176 15-34). University Park, PA, Pennsylvania State University, 1989, p. 17.3.1-17.3.6. Research supported by NTNF and Statkraft.

- [158] Ertesvög I.S. and Magnussen B.F., (2000) *"The Eddy Dissipation Turbulence Energy Cascade Model,"* Combust. Sci. Technol., 159(1), pp. 213-235, DOI : 10.1080/00102200008935784.
- [159] Bösenhofer M., Wartha E.-M., Jordan C. and Harasek M., (2018), *"The Eddy Dissipation Concept—Analysis of Different Fine Structure Treatments for Classical Combustion,"* Energies, 11, 1902 ; doi :10.3390/en11071902.
- [160] Sabelnikova V., Fureby C., (2013), *"LES combustion modeling for high Re flames using a multi-phase analogy,"* Combust. and Flame, 160, pp. 83-96.
- [161] URL <http://cantera.github.io/docs/sphinx/html/index.html>.
- [162] Pierce C.D. and Moin P., (2004), *"Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion,"* J. Fluid Mech, 504, 73-97.
- [163] Moin P., Squires K., Cabot W., and Lee S., (1991), *"A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport,"* Phys. Fluids A, 3(11), pp. 2746-2757.
- [164] Pitsch H., Chen M., and Peters N., (1998), *"Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames,"* 21st Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, pp. 1057-1064.
- [165] Menter F.R., Kuntz M., and Langtry R., (2003), *"Ten years of industrial experience with the SST turbulence model",* In Proceedings of the fourth international symposium on turbulence, heat and mass transfer, pages 625-632, Antalya, Turkey. Begell House.
- [166] Wilcox D.C., (1998), *"Turbulence Modeling for CFD,"* DCW Industries, Inc., La Canada, California.
- [167] Schumann U., (1975), *"Subgrid scale model for finite difference simulations of turbulent flows in plane channels and annuli,"* Journal of computational physics, 18(4), 376-404.
- [168] Montecchia M., Brethouwer G., Wallin S., Johansson A.V., and Knacke T., (2019), *"Improving LES with OpenFOAM by minimising numerical dissipation and use of explicit algebraic SGS stress model,"* Journal of Turbulence, 20 :11-12, 697-722, DOI :10.1080/14685248.2019.1706740.
- [169] Haider, S., Pang, K.M., Ivarsson, A. and Schramm, J., 2013, *"Combustion and radiation modeling of laminar premixed flames using OpenFOAM : A numerical investigation of radiative heat transfer in the RADIATE project",* CIMAC Congress, PAPER No. : 274, Shanghai.
- [170] Smith, T.F., Shen, Z.F. and Friedman, J.N., 1982, *"Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model",* J. Heat Trans-T. ASME, 104(4), 602-608.
- [171] Kee R. J., Coltrin M., and Glarborg P., (2003), *"Chemically reacting flow modeling : Theory & practice,"* Wiley, New York and Chichester.
- [172] Pitsch H. and Peters N., (1998), *"A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects,"* Combustion and Flame, 114(1-2), 26-40.
- [173] James, S., Anand, M.S., Razdan, M.K., and Pope, S.B., 1999, *"In Situ Detailed Chemistry Calculations in Combustor Flow Analyses",* ASME J. Energy Resour. Technol., 123(4), pp. 747-756.
- [174] Correa, S. M., 1993, *"Turbulence-Chemistry Interactions in the Intermediate Regime of Premixed Combustion",* Combustion And Flame, 93(1-2) 41-60.
- [175] Jones, W. P. and Lindstedt, R. P., 1988, *"Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion",* Combustion And Flame, 73(3), pp. 233-249.
- [176] Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T., and Ranzi, E., 2009, *"Accuracy and Flexibility of Simplified Kinetic Models for Cfd Applications",* 32 nd Annual Meeting of the Italian Section of the Combustion Institute.
- [177] <https://www.openfoam.com/OpenFOAM Version 2.4.0/Tutorial/reactingFoam>

- [178] Geuzaine C., and Remacle J.F., (2009), "*Gmsh : A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities*," International Journal for Numerical Methods in Engineering, 79 (11), 1309-1331. <https://doi.org/10.1002/nme.2579>
- [179] <https://cfd.direct/openfoam/user-guide/v6-indic-sli1/> dernière visite le 25/12/2020
- [180] Mcbride B.J., Gordon S. and Reno M.A., (1993), "NASA Technical Memorandum 4513, Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species,".
- [181] <https://tnfworkshop.org/data-archives/>(dernière visite le 13-09-2021)
- [182] Zhi-qing, W., "Study on correction coefficients of laminar and turbulent entrance region effect in round pipe". Appl Math Mech 3, 433-446 (1982).
- [183] Lysenko D.A., Ertesvåg I.S., Rian K.E., (2014), "*Numerical Simulations of the Sandia Flame D Using the Eddy Dissipation Concept*," Flow Turbulence Combust, 93, 665-687 DOI 10.1007/s10494-014-9561-5.
- [184] Baykal S.A., (2005), "*A hybrid unsteady flamelet model for large eddy simulation of turbulent diffusion flames*," Doctoral Thesis, Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) in Zürich, Switzerland, <https://doi.org/10.3929/ethz-a-005166828>.
- [185] Gemechu F.K., (2020), "*Evaluating the Potential of Domestic Animal Manure for Biogas Production in Ethiopia*," Hindawi-Journal of Energy, Article ID 8815484, <https://doi.org/10.1155/2020/8815484>.
- [186] Mameri A., and Tabet F., (2015), "*Numerical investigation of counter-flow diffusion flame of biogas-hydrogen blends : Effects of biogas composition, hydrogen enrichment and scalar dissipation rate on flame structure and emissions*, Int. J. of Hydrogen Energy, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.035>
- [187] Tang Y. and Raman V., (2021), "*Large eddy simulation of premixed turbulent combustion using a non-adiabatic, strain-sensitive flamelet approach*," Combustion and Flame, 234, December, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111655>.

Publications issues de la thèse

- 1.) **Noume H.C.**, Bomba V., Obounou M., Fouda H.E., Sapnken F.E., (2021), "*Computational Fluid Dynamics Study of a Nonpremixed Turbulent Flame Using openfoam : Effect of Chemical Mechanisms and Turbulence Models*," ASME J. Energy Resour. Technol., 143(11), p. 112303. <https://doi.org/10.1115/1.4049740>
- 2.) **Noume H.C.**, Bomba, V. and Obounou, M., (2020), "*Numerical Investigation of a Turbulent Jet Flame With a Compact Skeletal Mechanism*," ASME J. Energy Resour. Technol., 142(3), p. 032206. <https://doi.org/10.1115/1.4044556>

Hermann Chopkap Noume¹

Laboratory of Energy and Electrical and Electronic Systems,
Department of Physics,
Faculty of Science,
University of Yaounde I,
P.O. Box 812,
Yaounde, Cameroon
e-mail: noumher@gmail.com

Valentin Bomba

Department of Physics,
Faculty of Science,
University of Maroua,
P.O. Box 814,
Maroua, Cameroon
e-mail: bvalo2000@yahoo.ca

Marcel Obounou

Laboratory of Energy and Electrical and Electronic Systems,
Department of Physics,
Faculty of Science,
University of Yaounde I,
P.O. Box 812,
Yaounde, Cameroon
e-mail: marcelobounou@yahoo.fr

Henri Ekobena Fouda

Laboratory of Biophysics,
Department of Physics,
Faculty of Science,
University of Yaounde I,
P.O. Box 812,
Yaounde, Cameroon
e-mail: hekobena@gmail.com

Flavian Emmanuel Sapnken

Laboratory of Technologies and Applied Science,
University Institute of Technology,
University of Douala,
P.O. Box 8698,
Douala, Cameroon
e-mail: sapnken.emmanuel@gmail.com

Computational Fluid Dynamics Study of a Nonpremixed Turbulent Flame Using OPENFOAM: Effect of Chemical Mechanisms and Turbulence Models

This article presents a study of the influence of chemical mechanisms and turbulence models on Reynolds-averaged Navier–Stokes (RANS) simulations of the CH₄/H₂/N₂-air turbulent diffusion flame, i.e., the so-called DLR-A flame. The first part of this study is focused on the assessment of the influence of four chemical models on predicted profiles of the DLR-A flame. The chemical mechanisms considered are as follows: (i) a C₂ compact skeletal reduction method, (ii) a C₁ skeletal mechanism containing 41 elementary reactions amongst 16 species, (iii) the global mechanism by Jones and Lindstedt, (iv) and a global scheme consisting of the overall reactions of methane and dihydrogen. RANS numerical results (e.g., velocities, temperature, species, or the heat production rate profiles) obtained running the reactingFOAM solver with the four chemical mechanisms as well as the standard $k-\epsilon$ model, the partially stirred reactor (PaSR) combustion model, and the $P-1$ radiation model indicate that the C₂ skeletal mechanism yields the best agreement with measurements. In the second part of this study, four turbulence models, namely, the standard $k-\epsilon$ model, the renormalization group (RNG) $k-\epsilon$ model, realizable $k-\epsilon$ model, and the $k-\omega$ shear stress transport (SST) model, are considered to evaluate their effects on the DLR-A flame simulation results obtained with the C₂ skeletal mechanism. Results reveal that the predictions obtained with the standard $k-\epsilon$ and the RNG $k-\epsilon$ models are in very good agreement with the experimental data. Hence, for simple jet flame with moderately high Reynolds number such as the DLR-A flame, the standard $k-\epsilon$ model can model the turbulence with a very good accuracy. [DOI: 10.1115/1.4049740]

Keywords: chemical mechanisms, nonpremixed turbulent flame, multistage reduction method, OPENFOAM, PaSR, $P-1$ radiation, turbulence models

1 Introduction

The development of high-performance, low-polluting industrial combustion systems is increasingly based on numerical investigation. Specifically, with the existence and the development of modern high-performance computers, simulation of turbulent combustion phenomena in such systems has become a major approach to understand fundamental phenomena such as auto ignition and flame stabilization [1], the influence of pressure variation on flame velocity [2], the process of formation, emission and reduction of pollutants [3,4], and other phenomena encountered in combustion. Numerical investigation of turbulent combustion requires reliable (i) transport models, (ii) turbulence models, (iii) chemical models, (iii) combustion model, and (iv) radiation models. It is possible to study the influence of model variation in each of the

mentioned categories on computed results of a turbulent flame simulation. For instance, Cao and Pope [5] investigated the ability of seven chemical mechanisms to describe chemical phenomena (re-ignition and local extinction) in nonpremixed piloted jet flames D, E, and F using probability density function (PDF) calculations. The mechanisms used in their study include (i) two detailed mechanisms, namely, GRI3.0 and GRI2.11; (ii) two skeletal mechanisms, i.e., the mechanism by Smooke and the 41-steps skeletal mechanism used by Correa; (iii) and three reduced schemes, i.e., a five-step reduced mechanism (S5G211) and two augmented reduced mechanisms, namely, the 12-step ARM1 and the 15-step ARM2. They found that the performance of a chemical mechanism can be good for one flame and unsatisfactory for other flames. For example, calculations performed with the 41-step skeletal mechanism are consistent with measurements for flame F, whereas a poor agreement is obtained with the same mechanism in flames D and E simulation. In addition, their results indicate that the GRI3.0 overpredicts NO levels, whereas ARM2 and GRI2.11 predictions with respect to NO are reasonably accurate. Wang et al. [6] evaluated the performance of six global schemes in calculations of the jet hot coflow flame. Their results indicate

¹Corresponding author.

Contributed by the Advanced Energy Systems Division of ASME for publication in the JOURNAL OF ENERGY RESOURCES TECHNOLOGY. Manuscript received September 27, 2020; final manuscript received January 7, 2021; published online February 12, 2021. Assoc. Editor: Reza Sheikhi.

that the modified Westbrook and Dryer mechanism exhibits the best agreement with measurements. Zhou et al. [7] numerically assessed the performance of five chemical mechanisms by large eddy simulation (LES) in the case of a nonpremixed H_2/N_2 air jet flame. The chemical models considered in their study include four detailed mechanisms, namely, *GRI3.0*, the mechanisms of Davis et al. [8], Hong et al. [9], and Ó Conaire et al. [10] and the reduced scheme by Boivin et al. [11]. Their results reveal that the predicted temperature and main species profiles obtained with the five chemical models are in agreement with measurements. If intermediate species are taken into account, then the mechanism by Ó Conaire et al. [10] exhibits the best predictions. In addition, the reduced scheme by Boivin et al. [11] results in the lowest central processing unit (CPU) time (75% speed-up) than the detailed ones in a three-dimensional simulation. Concerning the influence of turbulence models, several works have recently been carried out. For example, the simulation of combustion in a three-dimensional micro-chamber was studied by Yilmaz et al. [12]. They evaluated the performance of four turbulence models, namely, the standard $k-\epsilon$ (STD), the renormalization group (RNG) $k-\epsilon$, the realizable $k-\epsilon$, and the Reynolds stress model (RSM). Numerical predictions obtained with the RNG $k-\epsilon$ model are in good agreement with measurements, while the predictions made with the RSM failed to reproduce the detailed characteristics of the combustion process. Recently, Khodabandeh et al. [13] carried out a study of the effects of turbulence models on the characteristics of turbulent nonpremixed combustion. They examined three turbulence models, namely, RSM, spectral turbulence analysis, and the RNG. According to their results, the root-mean-square (RMS) with the PDF approach is found to be almost 50% more accurate than other models for a swirling flow field. In the present work, the first part is focused on the influence of chemical models on predicted profiles of the $CH_4/H_2/N_2$ -air turbulent diffusion flame, i.e., the so-called DLR-A flame. To be more specific, four chemical mechanisms are considered in this work, namely, a C_2 skeletal mechanism that is generated using a multistage reduction method and tailored for the DLR-A flame simulation, the C_1 chemical mechanism by Yang and Pope [14], the global mechanism by Jones and Lindstedt [15], and a two-step global mechanism. In addition to chemical models, Reynolds-averaged Navier–Stokes (RANS) simulations are performed using the standard $k-\epsilon$ model, the PaSR combustion model as well as the $P-1$ radiation model. The influence of these chemical mechanisms on RANS predicted quantities such as temperature and mass fraction profiles of species is assessed in the case of the DLR-A flame simulation. The last part of this article evaluates the effect of turbulence models on the DLR-A flame simulation results obtained with the C_2 skeletal mechanism. For this purpose, four turbulence models, i.e., standard $k-\epsilon$, RNG $k-\epsilon$, realizable $k-\epsilon$, and $k-\omega$ shear stress transport (SST) models are used.

2 Description and Simulation of the Flame

2.1 Geometry of the Burner. Figure 1 displays the geometry of the burner. The DLR-A flame is the combustion of methane diluted in dihydrogen and nitrogen with a composition of 22.1% CH_4 , 33.2% H_2 , and 44.7% N_2 by volume. In general, the addition of hydrogen gas in methane stabilizes the turbulent flame, while the addition of nitrogen decreases heat radiation and improves the quality of measurements [16]. This fuel is burnt with air. The initial conditions of the DLR-A flame, i.e., temperature, velocity, and mass fraction of reactants, are given in Table 1.²

The computational domain generated by the code gmsh is a wedge, i.e., a 2D-axisymmetric domain of 1 m length, 0.2 m radius, and a cylindrical angle of 5 deg in the azimuthal direction (see Fig. 2). In this study, the number of cells used in the calculations is 8200. The cells are concentrated close to the fuel inlet to

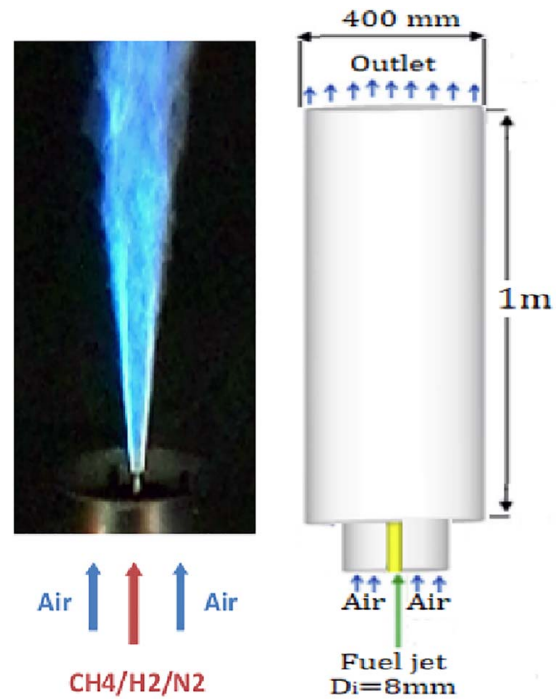


Fig. 1 Geometry configuration of the burner

Table 1 Initial conditions of the DLR-A flame

	T (K)	U (m/s)	Y_{CH_4}	Y_{H_2}	Y_{N_2}	Y_{O_2}
Fuel	292	42.2	0.212	0.04	0.749	0
Air	292	0.3	0	0	0.77	0.23

accurately calculate the fluctuations and chemical phenomena, which are more pronounced in this region.

2.2 Flame Simulations. In this study, the numerical investigation of the DLR-A flame has been carried out using reactingFoam, a combustion solver available in the OPENFOAM code. This code has been used in many research projects in recent years [–3,17,23]. It is an open-source, free code designed for continuous media mechanics applications, especially for computational fluid dynamics applications. The code is based on c++ object-oriented programming. A key features of the OPENFOAM code is its convenience in terms of reuse and development of new solvers and models, unlike single-block programming codes that are somewhat difficult for custom development.

3 Numerical Modeling

3.1 Governing Equations. The averaged RANS equations used in this study contain unclosed quantities that must be modeled using turbulence and combustion models. According to Favre's averages formalism, the averaged equations are as follows [23]:

Equation of continuity:

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

Equation of momentum:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{u}) = -\nabla \cdot \bar{P} + -\nabla \cdot (\tilde{\tau}_{eff}) \quad (2)$$

²<https://www.sandia.gov/TNF/DataArch/DLRflames.html>

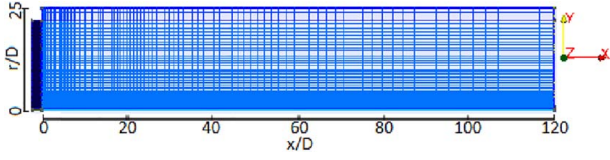


Fig. 2 2D-axisymmetric mesh

Table 2 Constant parameters of the standard $k-\varepsilon$ turbulence model

C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	σ_k	σ_ε
0.09	1.44	1.92	1.0	1.3

Species transport equation:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}_k) = \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla \tilde{Y}_k) + \tilde{\omega}_k \quad (3)$$

Equation of sensible enthalpy:

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{h}_s) = \nabla \cdot (\alpha_{eff} \nabla \tilde{h}_s) + \tilde{\omega}_T - \nabla \tilde{q}_r \quad (4)$$

where u is the velocity vector, P is the pressure, ρ is the flow density, h_s is the sensible enthalpy, Y_k is the mass fraction of species, and \tilde{q}_r is the radiative heat loss. In Eq. (2), τ_{eff} denotes the effective stress tensor. In Eqs. (3) and (4), μ_{eff} and α_{eff} are the effective dynamic viscosity and effective dynamic thermal diffusivity, respectively. The calculation details of these parameters can be found, for example, in the work by Kassem et al. [23]. Prandtl and Schmidt are assumed to be one for each species.

3.2 Turbulence Modeling

3.2.1 Standard $k-\varepsilon$ Model. According to the standard $k-\varepsilon$ model devised by Jones and Launder [24], the turbulent viscosity, the transport equations of the turbulent kinetic energy k , and the dissipation energy ε are defined as follows:

$$\mu_t = \tilde{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (5)$$

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = P_k + \nabla \cdot \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right] \nabla \tilde{k} \right) - \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right] \nabla \tilde{\varepsilon} \right) + \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon}) \quad (7)$$

where P_k is the production rate of $(\tilde{\rho} \tilde{k})$, and the other model coefficients are presented in Table 2.

Among limitations of the standard $k-\varepsilon$ model, one can enumerate the following: (i) the model is only valid for fully turbulent flows, (ii) the model overestimates the decay rate and the spread rate of round jets [25], and (iii) the model is not suitable for complex flows involving a severe pressure gradient [26].

3.2.2 Renormalization Group Theory $k-\varepsilon$ Model. The equations of the RNG $k-\varepsilon$ model are different from those of the standard $k-\varepsilon$ model by an additional term in the ε equation. This term takes into account the interaction between turbulence dissipation and mean shear, which allows the effect of vortex on turbulence to be effectively modeled. It is thus able to improve the predictions of the high curvature of streamlines and rate of strain as well as the simulation of transient flows, mass transfer, and wall heat [27]. The

transport equations for the RNG $k-\varepsilon$ model are given as follows:

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = P_k + \nabla \cdot \left(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \nabla \tilde{k} \right) - \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (8)$$

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left(\alpha_k \mu_{eff} \nabla \tilde{\varepsilon} \right) + \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon}) - R_\varepsilon \quad (9)$$

All the terms of the aforementioned equations are similar to those of the standard $k-\varepsilon$ model except for α_ε and α_k , which are inverse of Prandtl number for ε and k , respectively. The additional term R_ε in the RNG $k-\varepsilon$ model, is given by

$$R_\varepsilon = \frac{C_\mu \rho \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{k} \quad (10)$$

where $\eta_0 = 4.38$, $\eta \equiv S_k/\varepsilon$, and $\beta = 0.012$. More details on the RNG $k-\varepsilon$ model and its applications can be found in the literature [27].

3.2.3 Realizable $k-\varepsilon$ Model. This model is well suited for an accurate prediction of the spread rate of round jets [28]. In this model, the transport equation of k is identical to that of the standard $k-\varepsilon$ model. However, the realizable $k-\varepsilon$ model differs from the standard $k-\varepsilon$ model at the level of (i) the turbulent viscosity formulation (C_μ is now variable instead of constant) and (ii) the improved transport equation for the dissipation rate ε . The model constants C_2 , σ_k , and σ_ε have the values 1.9, 1, and 1.2, respectively. The transport equations for the realizable $k-\varepsilon$ model are given as follows:

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = P_k + \nabla \cdot \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right] \nabla \tilde{k} \right) - \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (11)$$

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{\varepsilon})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{\varepsilon}) = \nabla \cdot \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right] \nabla \tilde{\varepsilon} \right) + \rho C_1 S_\varepsilon - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} \quad (12)$$

where $C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right]$, $\eta = S \frac{k}{\varepsilon}$, and $S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}}$. C_μ is computed as follows: $C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{U^* k}{\varepsilon}}$, where U^* is a function of velocity gradients and A_0 and A_s are constants.

3.2.4 $k-\omega$ Shear Stress Transport Model. Introduced by Menter et al. [29], the $k-\omega$ SST model combines both the Wilcox $k-\omega$ formulation [30] in the inner parts of the boundary layer (near the wall) and the STD model in the free flow. The SST model can be used for low Reynolds numbers without considering an additional damping function. The equations for this model are as follows:

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{k})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = \tilde{P}_k + \nabla \cdot \left(\Gamma_k \nabla \tilde{k} \right) - \gamma_k \quad (13)$$

$$\frac{\partial (\tilde{\rho} \tilde{\omega})}{\partial t} + \nabla \cdot (\tilde{\rho} \tilde{u} \tilde{\omega}) = P_\omega + D_\omega + \nabla \cdot \left(\Gamma_\omega \nabla \tilde{\omega} \right) - \gamma_\omega \quad (14)$$

where \tilde{P}_k is the mean production of turbulent kinetic energy defined as $\tilde{P}_k = \min(P_k, 10 \rho \beta^* k \omega)$. Other terms (P_k , Γ_k , Γ_ω , D_ω , γ_k , and γ_ω) are defined in Ref. [26].

3.3 Closure of Turbulent Combustion. It is important to use a robust model capable of taking into account the turbulence-chemistry interaction. The objective here is to compute the mean rate of species $\tilde{\omega}_k$. In this study, the partially stirred reactor (PaSR) combustion model is used. Designed as an extension of the EDC approach [31], the PaSR combustion model states that each

computational cell is divided into two zones: a reaction zone that can be treated as perfectly stirred reactor (PSR) and a nonreaction zone. The relationship between the concentrations (c_0 , c , and c_1) within the computational cell is written as follows [32]:

$$c_1 = \kappa c + (1 - \kappa)c_0 \quad (15)$$

where c_0 is the concentration in the cell feed stream or the initial cell concentration, c is the unknown concentration in the reaction zone, c_1 is the output concentration of the cell, and κ is the volume fraction of the reactive micromixing zone. The reactive fraction κ depends on both the chemical time scales τ_{ch} and the micromixing time scales τ_{mix} ; if $\tau_{ch} \gg \tau_{mix}$, then $\kappa \approx 1$ and κ is closed to 0 when $\tau_{ch} \ll \tau_{mix}$. The reactive fraction is expressed as follows [32,33]:

$$\kappa = \frac{\tau_{ch}}{\tau_{mix} + \tau_{ch}} \quad (16)$$

where

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \epsilon}} \quad (17)$$

μ_{eff} is defined by Eq. (6).

The mean reaction rate for species i is given by the following expression [32,33]:

$$\tilde{\omega}_i = \kappa \dot{\omega}_i \quad (18)$$

where $\dot{\omega}_i$ is the reaction rate of species i according to the kinetic mechanism used.

3.4 Presentation of Chemical Mechanisms. Gas phase combustion is the irreversible evolution of a gas mixture from an initial state to another state considered final with the energy production. This evolution of the gaseous mixture is described thanks to chemical kinetics models. It can be described with different levels of complexity, ranging from a single global reaction to a detailed mechanism containing several thousand elementary reactions among sometimes more than a hundred species. To optimize the computation cost, large detailed chemical mechanisms are reduced to smaller ones by methods such as direct relation graph (DRG) [19,34,35], computational singular perturbation [18,36], rate-controlled constrained equilibrium [37–39], etc. The following paragraphs present the mechanisms used for the different calculations performed in this work.

3.4.1 C_2 Skeletal Mechanism. Using our reduction program based on the multistage technique developed by Bombá [35], a C_2 skeletal mechanism is generated and tailored for “DLR-A flame” simulations. Four methods are used in this multistage reduction technique, namely, the DRG [34], the DRG-aided sensitivity analysis (DRGASA), unimportant reaction elimination, and reaction elimination based on DRGASA. Details about the four-stage reduction technique and its implementation in the case of the flamelet approach can be found in the previous work carried out by Noume et al. [19].

The implementation of this four-stage reduction technique using the following unsteady flamelet equations [40,41] in the mixture fraction space:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + w_k \quad (19)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^K h_k w_k \quad (20)$$

with the conditions (boundary temperature = 300 K, pressure $p = 990$ mbar; the scalar dissipation rate is defined as follows [42]: $\chi \approx \frac{\alpha_\infty}{\pi} \exp\{-2[\text{erfc}^{-1}(2Z)]^2\}$) and the GRI3.0 as the starting mechanism resulted in a C_2 skeletal mechanism consisting of 51

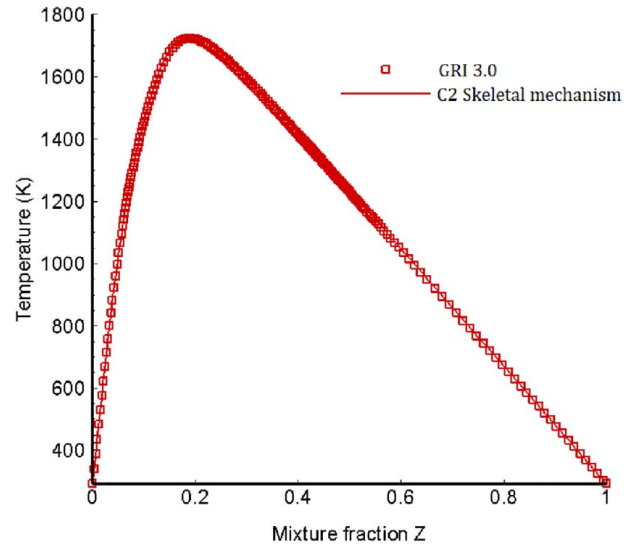


Fig. 3 Comparison of temperature distributions in the mixture fraction space as obtained with the C_2 skeletal mechanism (21 species and 51 reactions) and the GRI3.0 mechanism (53 species and 325 reactions)

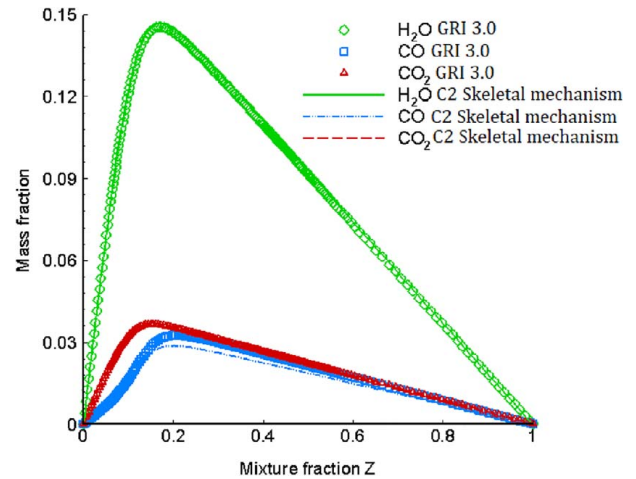


Fig. 4 Comparison of species mass fraction distributions in the mixture fraction space as obtained with the C_2 skeletal mechanism (21 species and 51 reactions) and the GRI3.0 mechanism (53 species and 325 reactions)

Table 3 Two-step chemical model

Global reaction step	A	n	E
$\text{CH}_4 + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$	$5.2\text{E} + 19$	0	29,620
$\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 = \text{H}_2\text{O}$	$9.87\text{E} + 11$	0	15,600

Note: Units of A (mol, cm^3 , and s) and E (cal/mole). See REACTINGFOAM from OPENFOAM at³

elementary reactions among 21 species, i.e., H_2 , H , O , O_2 , OH , H_2O , HO_2 , CH_2 , $\text{CH}_2(\text{S})$, CH_3 , CH_4 , CO , CO_2 , HCO , CH_2O , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_5 , C_2H_6 , N_2 , and AR. The C_2 skeletal mechanism is validated against the initial detailed mechanism, i.e., the GRI3.0 mechanism (see Figs. 3 and 4).

From these figures, we can see that the C_2 skeletal mechanism consistently reproduces the characteristics of the GRI3.0 mechanism. One objective of this study is to compare the performance

³<https://www.openfoam.com/>

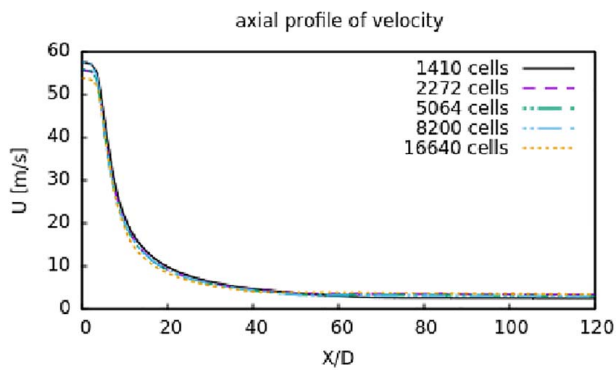


Fig. 5 Mesh independence study

Table 4 Average execution times per iteration

Chemical mechanism	Species	Reactions	Execution time (s)
C ₂ skeletal scheme	21	51	1.82
C ₁ skeletal scheme	16	41	1.76
Jones Lindstedt scheme	7	4	0.86
Two-step global scheme	6	2	0.28

of the C₂ mechanism with others available in the literature and hence assess their influence on RANS simulation results of the DLR-A flame.

3.4.2 Other Reduced Mechanisms. The second chemical mechanism used in this work is a C₁ skeletal mechanism developed by Yang and Pope [14]. This chemical mechanism contains 41 elementary reactions among 16 species and has been previously used in turbulent flame simulations [18,42]. This C₁ mechanism is derived from a more large mechanism, i.e., the mechanism by Correa [43], which contains 27 species and 77 elementary reactions. The species involved in the simplified mechanism by Yang and Pope are as follows: CH₄, O₂, CO₂, H₂O, CO, H, H₂, O, OH, CH₂O, HCO, CH₃, HO₂, H₂O₂, CH₃O, and N₂.

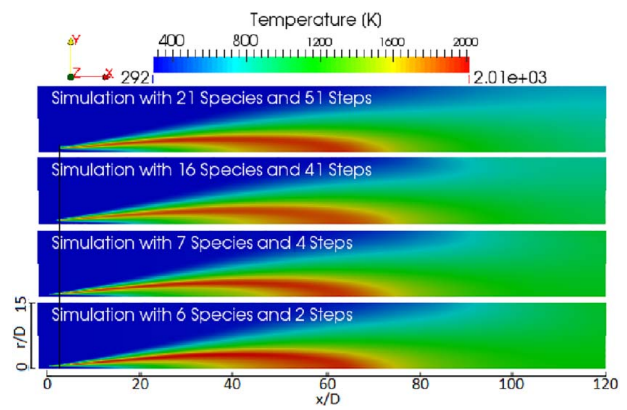


Fig. 6 Temperature contours as computed with the four chemical mechanisms, i.e., C₂ mechanism (21 species and 51 reactions), C₁ mechanism (16 species and 41 reactions), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions), and the two-step global mechanism (six species and two reactions)

The third mechanism is the global kinetic model devised by Jones and Lindstedt [15] (JL). This chemical scheme involves seven species, namely, CH₄, O₂, CO₂, H₂O, CO, H₂, and N₂ and 4 reactions. This chemical model has been used in many studies [44–47]. Finally, the fourth chemical model used in this work is presented in Table 3. It consists of two global equations, which describe the oxidation of methane and dihydrogen in air, respectively. This mechanism involves six species. In Table 3, *A*, *n*, and *E* denote the preexponential constant, the frequency factor, and the activation energy, respectively.

4 Results and Discussion

The present simulations were performed using a core i5 desktop containing four processors of 3.20 GHz each and a 8 GB RAM. Calculations were done in parallel to optimize computation time. Table 4 presents the average run times per iteration in our calculations for each chemical mechanism used. We can see from Table 4 that the computational time increases with the size of the chemical

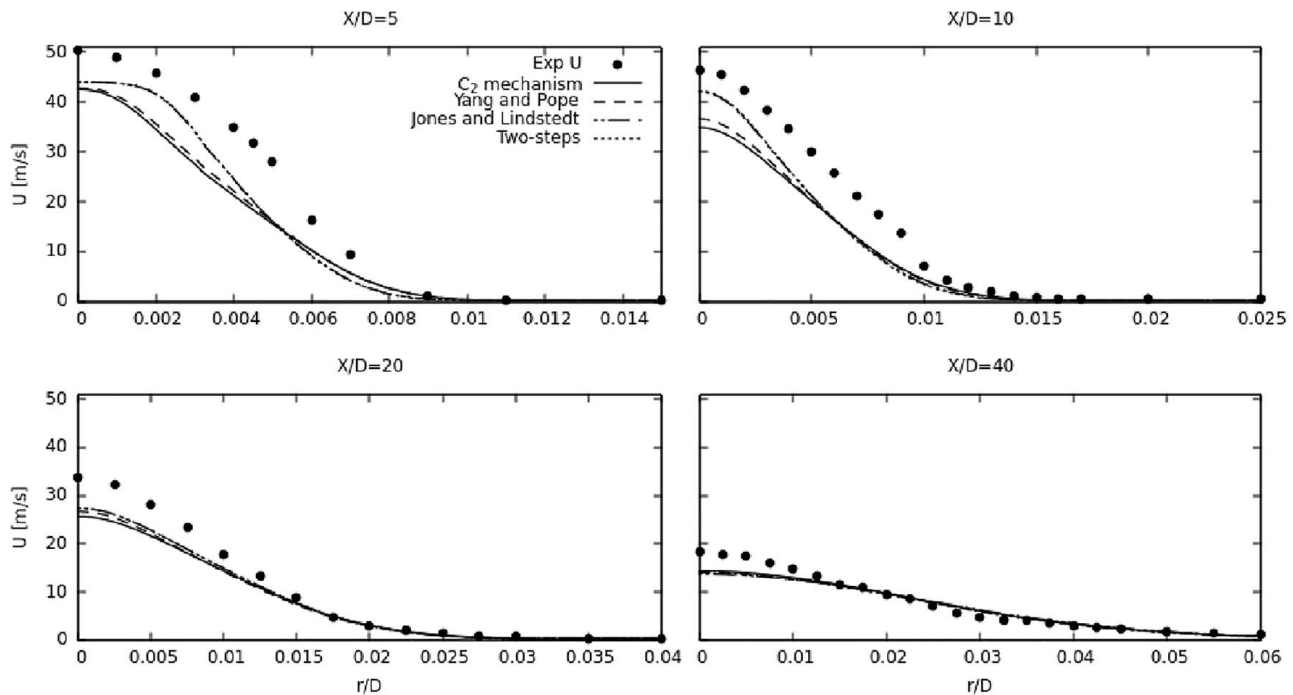


Fig. 7 Radial distributions of the velocity at four different X/D locations

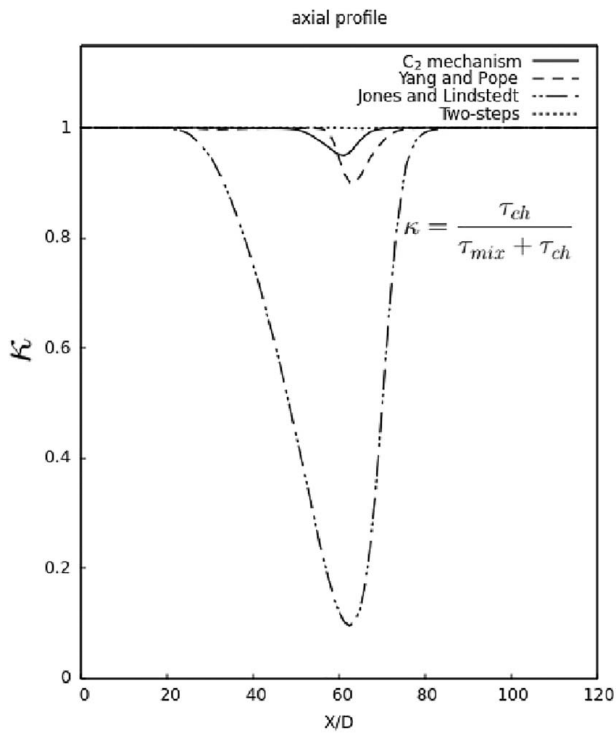


Fig. 8 Reactive fraction distribution on the burner axis as obtained with the four reaction mechanisms, namely, C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (six species and two reactions; dashed line)

mechanism, and consequently, calculation with the two-step mechanism requires less CPU time compared to the ones with skeletal mechanisms.

A mesh independence study has been conducted with five different mesh sizes (1410, 2272, 5064, 8200, and 16,640 cells). The

predicted velocity profiles in the axial direction obtained with these meshes are almost identical. Hence, for subsequent calculations, a mesh containing 8200 cells has been used.

4.1 Effect of Chemical Mechanisms. Figure 6 shows the temperature contours as computed with the four chemical mechanisms. It can be seen from Fig. 6 that the predicted flame lengths are of same order.

In the rest of this section, numerical results obtained with (i) the four chemical mechanisms mentioned earlier, (ii) the standard $k - \epsilon$ model, (iii) the PaSR combustion model, and (iv) the $P - 1$ radiation model are presented and discussed. These results are displayed in Figs. 7–15. More specifically, Fig. 7 compares radial distribution of the averaged velocity, in four positions ($X/D = 5, 10, 20, 40$), as obtained with the different chemical models used in the DLR-A flame simulation. It can be seen that, near the burner nozzle ($X/D = 5, 10$), the measured averaged velocity is higher than predictions obtained with the mechanisms. A better agreement is obtained as we go further downstream. These results can be improved by using advanced turbulence modeling techniques such as hybrid LES/RANS methods.

Figure 8 shows the reactive fraction distribution on the axial direction of the burner. The reactive fraction can be written as follows:

$$\kappa = \frac{\tau_{ch}}{\tau_{mix} + \tau_{ch}} = \frac{1}{Da + 1} \quad (21)$$

where $Da = \tau_{mix}/\tau_{ch}$ denotes the Damkoler number. It can be seen from this graph that there are two categories of regions: (i) regions characterized by $\kappa \approx 1$, i.e., $\tau_{mix} \ll \tau_{ch}$ or $Da \ll 1$. In this region, the local flame is considered perfectly agitated. So we get closer to the mixing model, “Perfectly Stirred Reactor” (PSR). This suggests that mixing speeds are very high or that chemical reaction rates are very slow. The rate of combustion is dominated by the chemical kinetics of the mixture; the mixing process can be neglected and chemistry becomes the dominant phenomena. (ii) In regions characterized by $\kappa < 1$, for each chemical mechanism, the location of κ minimal value is around the position $X/D = 60$, which matches the peak flame temperature location. This is the maximum flame temperature region. In such regions, very strong deformations of the flame occur.

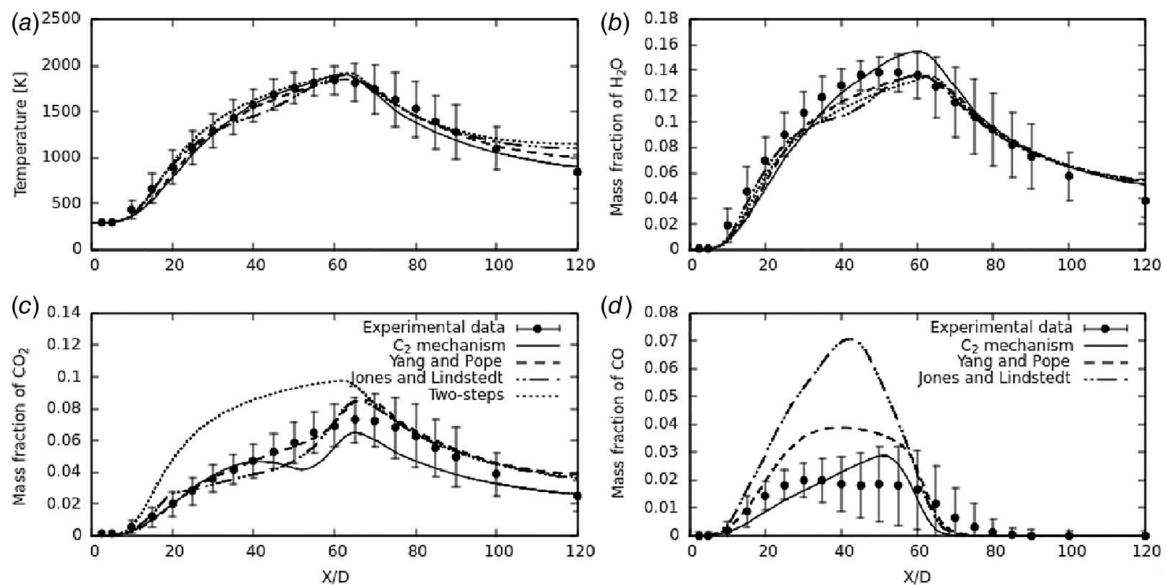


Fig. 9 Axial distributions of mean temperature and H_2O , CO_2 , and CO mean mass fraction as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (six species and two reactions; dashed line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

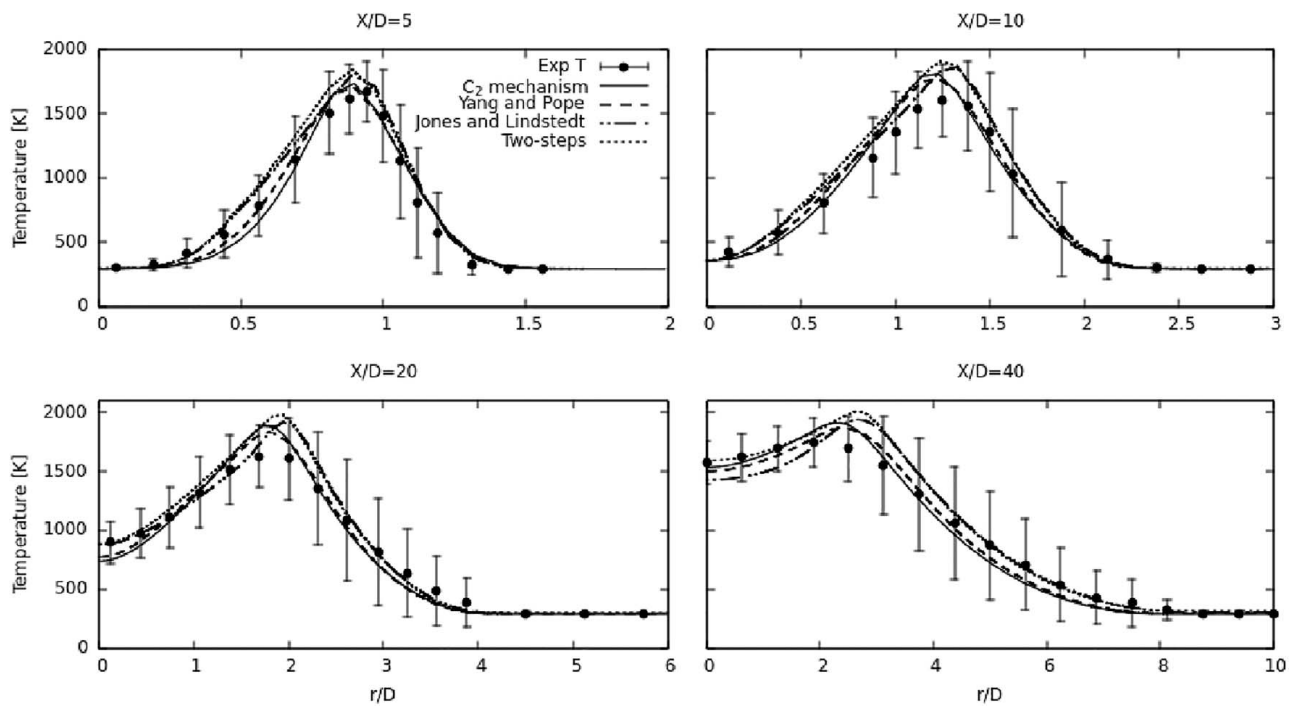


Fig. 10 Radial distributions of the mean temperature at four different X/D locations as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (six species and two reactions; dotted line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

In Figs. 9–14, results of simulations obtained with different chemical models are validated against the experimental data. The errors bars seen in these figures are plotted using the RMS fluctuations. Following Bergmann et al. [48], the experimental uncertainties are around 5% and 10% for temperature and for

all species, respectively, except for CO, where the error can be as high as 30–50% because of low concentrations in the flame. Following Bergmann et al. [48], the experimental uncertainties are estimated to be less than 5% for temperature and less than 10% for all mass fractions of species, except for CO, where the

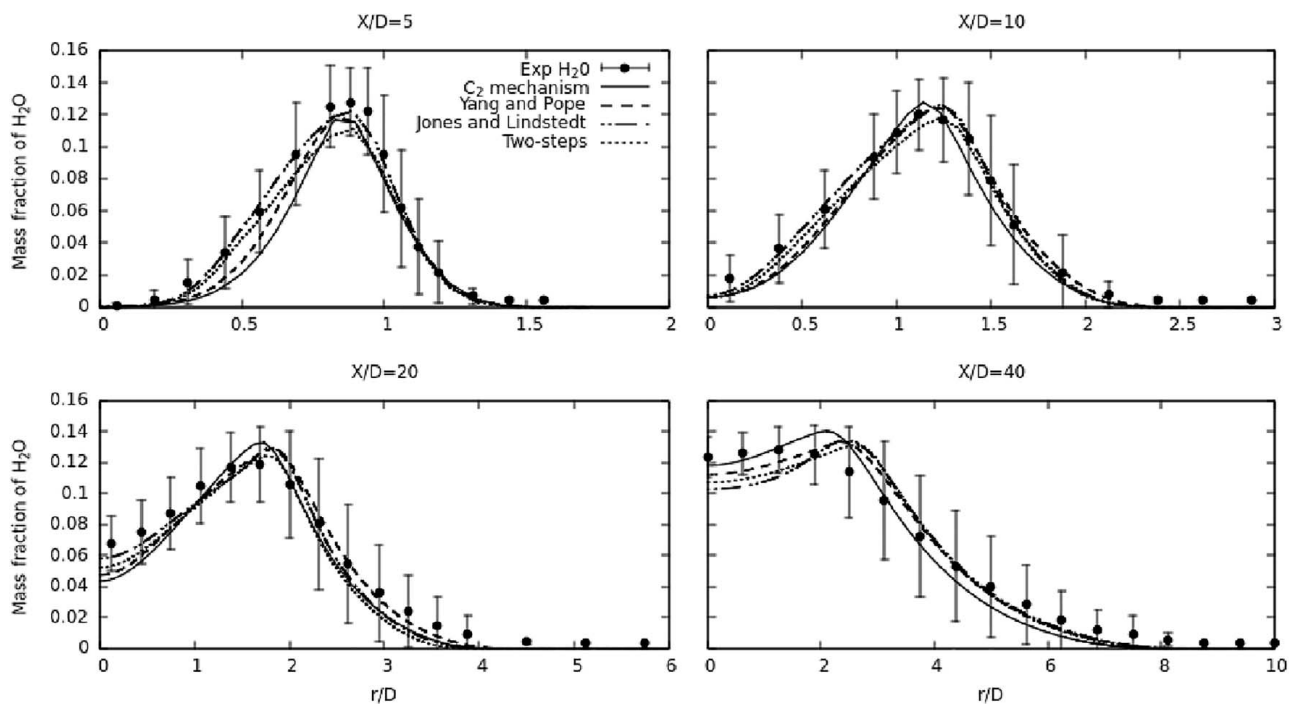


Fig. 11 Radial distributions of the H_2O mean mass fraction at four different X/D locations as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (six species and two reactions; dotted line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

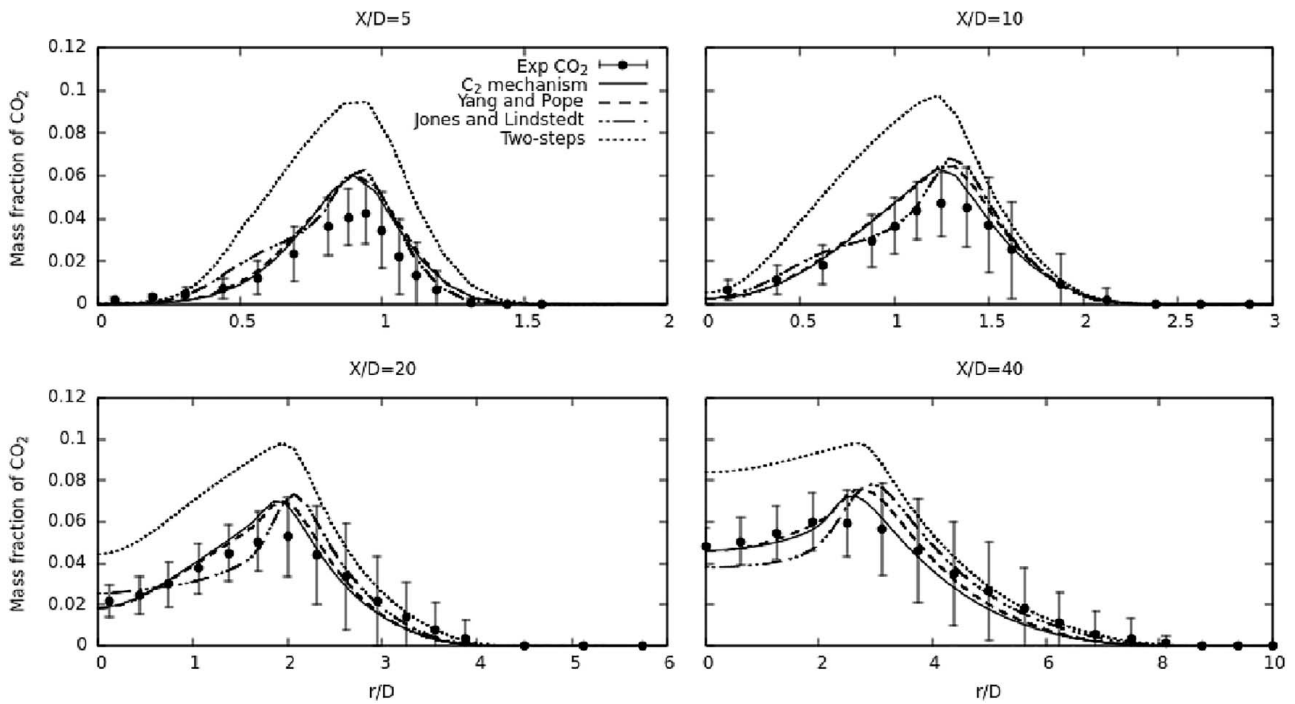


Fig. 12 Radial distributions of the CO_2 mean mass fraction at four different X/D locations as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-steps global mechanism (six species and two reactions; dotted line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

error can reach 30–50% because of low concentrations in the flame.

Figure 9 displays temperature and mass fraction profiles of few combustion products in the axial direction. The computed temperature and mass fraction profiles of species H_2O are consistent with

measurements; all the predicted profiles remained within the experimental uncertainty (see Figs. 9(a) and 9(b)). However, some discrepancies are observed in Figs. 9(c) and 9(d). To be more specific, calculations performed with the two-step scheme significantly overpredicts the mass fraction profile of species CO_2 .

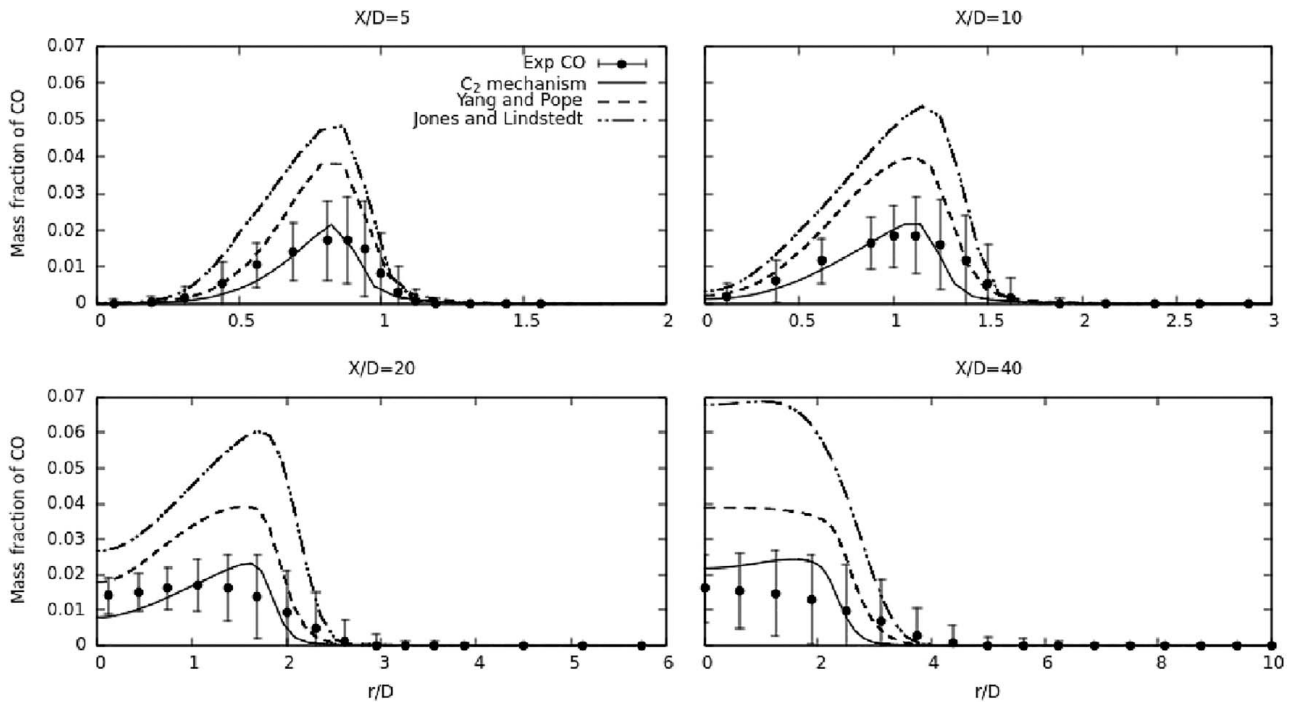


Fig. 13 Radial distributions of the CO mean mass fraction at four different X/D locations as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (seven species and two reactions; dotted line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

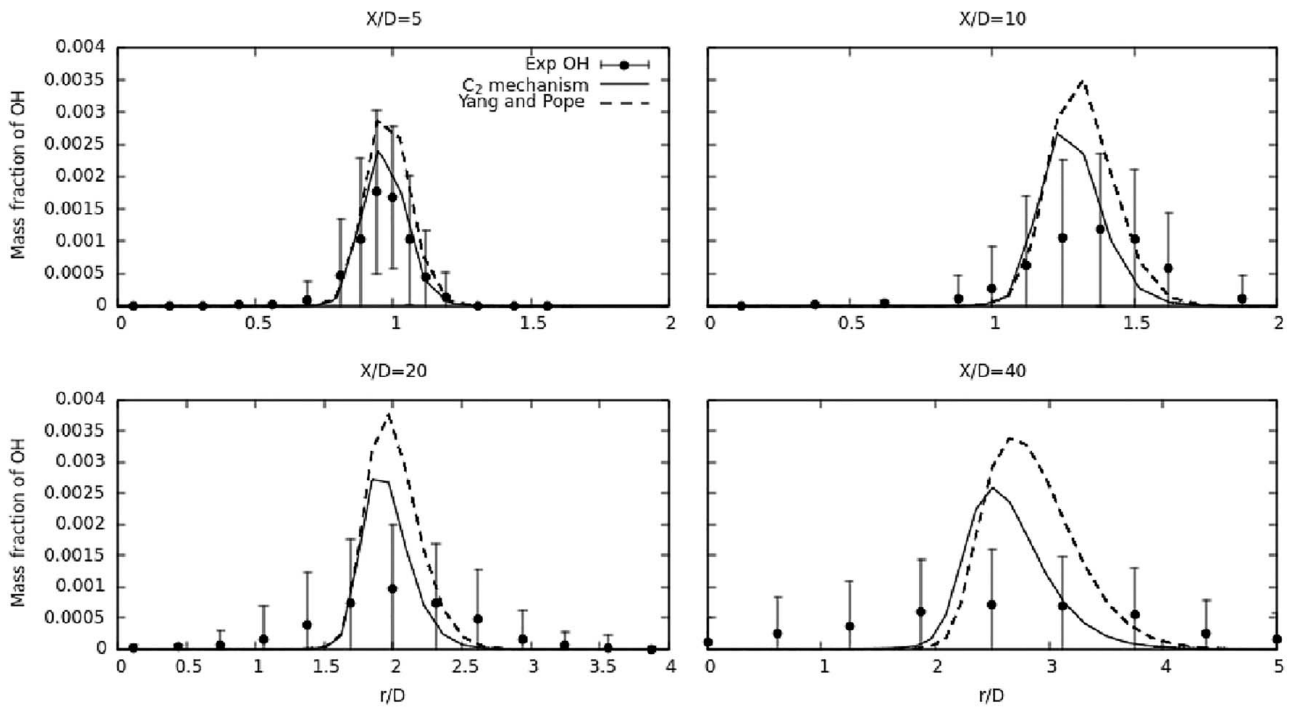


Fig. 14 Radial distributions of the OH mean mass fraction at four different X/D locations as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (six species and two reactions; dotted line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

This can be explained by the reason that the two-step scheme fails to describe the production of CO species during combustion. For the species CO, only the C_2 skeletal mechanism exhibits a satisfactory agreement with the experiment. In general, the numerical results presented in Fig. 9 indicate that the C_2 skeletal mechanism yields the best agreement with measurements.

Radial profiles of temperature, at four axial locations ($X/D = 5, 10, 20, 40$), are illustrated in Fig. 10. In all the four selected positions, the predicted temperature profiles are consistent with measurements. Specifically, the shapes and the peak temperature values are correctly estimated by the calculations performed using

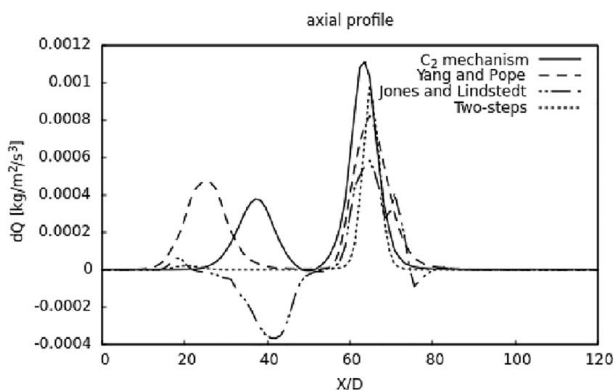


Fig. 15 Axial profile of the heat production rate as obtained with the four chemical mechanisms, i.e., C_2 mechanism (21 species and 51 reactions; solid line), Yang and Pope mechanism (16 species and 41 reactions; dotted line), Jones Lindstedt mechanism (seven species and four reactions; dot-dot-dashed line), and the two-step global mechanism (six species and two reactions; dotted line) in comparison with the experimental data (error bar with filled circle symbol)

the different chemical mechanisms. The calculations give rise to a correct expansion of the profiles width, which is also the consequence of a good estimation of the gradients of the density and the dynamic variables (U, k, ϵ), almost in all the regions and positions of the flame.

The radial distributions of the mass fractions of $H_2O, CO_2, CO,$ and OH are also illustrated in Figs. 11–14. Specifically, all the four mechanisms reproduce with a good accuracy mass fraction profiles of H_2O (all the profiles are located within the uncertainties regions given by the RMS fluctuations (see Fig. 11)). Similarly to the axial profile, the two-steps global mechanism significantly overpredicts the mass fraction profile of CO_2 in the radial direction as shown in Fig. 12. As mentioned earlier, this discrepancy can be explained by the fact that the two-step global scheme does not describe the production of CO. The predicted CO_2 profiles obtained with the three other reaction mechanisms are in good agreement with measurements. Concerning the radial profile of species CO shown in Fig. 13, results report that only the C_2 skeletal mechanism predictions are in agreement with measurements. Similarly, the OH profiles obtained with the C_2 mechanism better agree with the experimental data compared to the C_1 mechanism predictions (see Fig. 14).

Figure 15 shows a comparison of predicted axial distribution of the heat production rate calculated from fuel consumption rate matrix, as obtained with the four reaction mechanisms. The predicted heat release profiles obtained with the C_1 and C_2 skeletal mechanisms show two heat release zones, namely the primary and the secondary exothermic zones. In addition, the location of the peak heat release rate is around the axial position $X/D = 60$, which is consistent with the maximum temperature location.

In general, the DLR-A flame simulation results presented in this section indicate that the C_2 skeletal mechanism yields the best agreement with measurements, although this mechanism is the most CPU demanding. For instance, only the CO_2 and CO mass fraction profiles obtained using the C_2 skeletal mechanism are consistent with the experimental data.

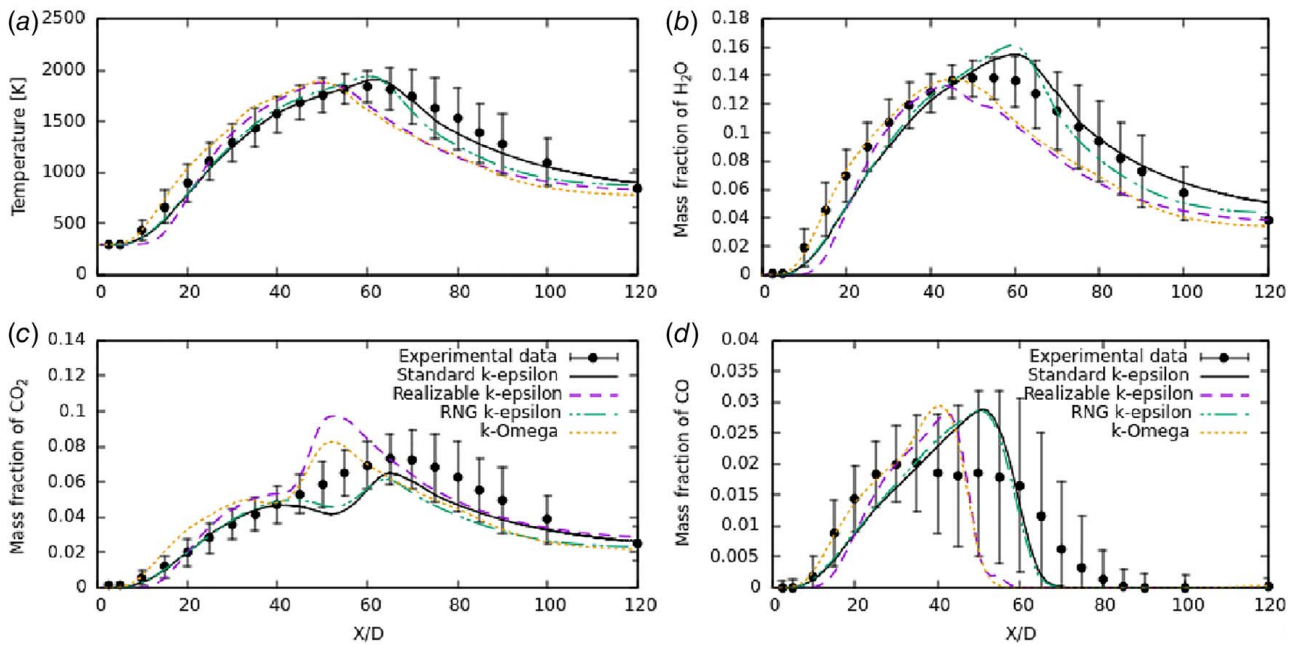


Fig. 16 Axial distributions of mean temperature and H₂O, CO₂, and CO mean mass fraction as obtained with the four turbulence models: standard $k - \epsilon$ (solid line), realizable $k - \epsilon$ (dashed line), RNG $k - \epsilon$ (dot-dot-dashed line), and $k - \omega$ SST (dotted line) in comparison with measurements (error bar with filled circle symbol)

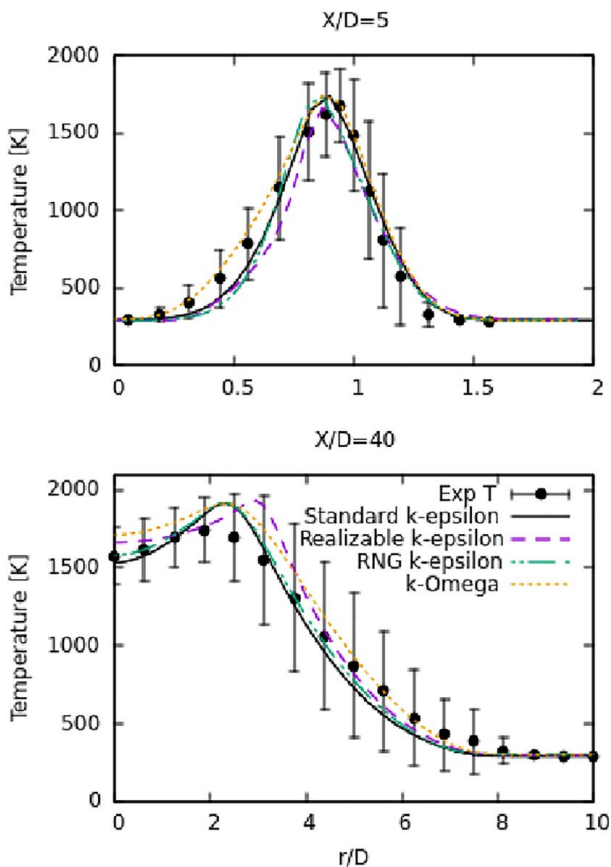


Fig. 17 Radial distributions of mean temperature at two different X/D positions as obtained with the four turbulence models: standard $k - \epsilon$ (solid line), realizable $k - \epsilon$ (dashed line), RNG $k - \epsilon$ (dot-dot-dashed line), and $k - \omega$ SST (dotted line) in comparison with measurements (error bar with filled circle symbol)

4.2 Effect of Turbulence Models. In this section, the influence of turbulence models on DLR-A flame simulation results obtained with C₂ skeletal mechanism is evaluated. The flow field is predicted by RANS-based turbulence models such as STD, realizable $k - \epsilon$, RNG $k - \epsilon$ (RNG), and $k - \omega$ SST (SST) models. The RANS-based turbulence models are used in the current simulations because they yield reduced computation times compared to LES or direct numerical simulation models.

Figure 16 presents a comparison between experimental data and predicted temperature and mass fraction profiles of H₂O, CO₂, and CO as obtained with the C₂ skeletal mechanism and the four aforementioned turbulence models in the axial direction. The computed profiles are globally consistent measurements in the axial direction of the burner. Specifically, these profiles indicate that the STD and RNG models yield the best agreement with measurements.

Figure 17 displays a comparison between the predicted radial temperature distributions as obtained with the four turbulence models and experimental data at two axial positions, i.e., $X/D = 5$ and $X/D = 40$. It can be seen from this figure that all the turbulence models reproduce measurements fairly well, especially when the experimental uncertainty is taken into account. This could be explained by (i) the absence of recirculation zones in the flame and (ii) the DLR-A flame is a simple jet with a moderate Reynolds number.

5 Conclusions

The CH₄/H₂/N₂-air turbulent diffusion flame has been numerically investigated using four reaction mechanisms. The mechanisms used in this article include a two-step global scheme, the global mechanism proposed by Jones and Lindstedt, the C₁ skeletal mechanism by Yang and Pope [14], and a C₂ skeletal mechanism derived using an in-house reduction code. The results indicate that (i) the predicted profiles of temperature and mass fraction of the species H₂O obtained with the four mechanisms are very close to experimental measurements; (ii) the two-step mechanism significantly

overpredicts the CO₂ mass fraction profile due to the reason that it fails to describe the CO production in the flame; and (iii) only the predictions of the C₂ mechanism for CO and OH species are in good agreement with the experimental measurements. In general, the C₂ mechanism gives the best predictions (although it is the most CPU demanding). Using the C₂ mechanism, the performance of four turbulence models, namely, standard $k-\varepsilon$, realizable $k-\varepsilon$, RNG $k-\varepsilon$, and $k-\omega$ SST models are evaluated. Results show that the predictions obtained with the standard $k-\varepsilon$ model yield a similar good agreement with the experimental data as the one obtained with the RNG $k-\varepsilon$ turbulence model. Hence, for simple jet flame with moderately high Reynolds number such as the DLR-A flame, the standard $k-\varepsilon$ can model the turbulence with a good accuracy. Future studies can include the implementation of a hybrid RANS-LES model to further improve numerical results. In addition, the multistage reduction technique used to derive the C₂ skeletal mechanism will be enhanced to obtain a shorter—and hence less CPU demanding—skeletal mechanism.

Acknowledgment

The authors would like to thank the German Academic Exchange Service (DAAD) for providing the computational resources used in this work through its Small Equipment Programme. We thank Sandia Laboratory for the experimental data downloaded for free on their website. We would also like to thank the editors for carefully reading and coordinating the review of the paper, which allowed us to improve it.

Conflict of Interest

There are no conflict of interest.

Nomenclature

k	= turbulent kinetic energy
p	= pressure
t	= time
u	= velocity vector
T	= temperature
h_s	= enthalpy of species k
Y_k	= mass fraction of species k
α_{eff}	= effective dynamic thermal diffusivity
α_k and α_ε	= inverse effective Prandtl numbers for k and ε (RNG model)
σ_k and σ_ε	= turbulent Prandtl numbers for k and ε , respectively
ε	= turbulent dissipation rate
μ_{eff}	= effective dynamic viscosity
μ_t	= turbulent viscosity
ρ	= gas mass density
τ	= shear stress tensor
τ_{ch}	= chemical timescale
τ_{eff}	= effective stress tensor
τ_{mix}	= turbulent mixing timescale
ϕ	= Favre-averaged part of ϕ
ϕ''	= fluctuation part of ϕ
$\dot{\omega}_k$	= mass rate of production of species k
$\dot{\omega}_T$	= heat source

References

- Mouangue, R., Obounou, M., Gomet, L., and Mura, A., 2013, "Lagrangian Intermittent Modelling of a Turbulent Lifted Methane-Air Jet Flame Stabilized in a Vitiated Air Coflow," *Flow Turbul. Combust.*, **92**(3), pp. 731–765.
- Hu, S., Gao, J., Gong, C., Zhou, Y., Bai, X. S., Li, Z. S., and Alden, M., 2017, "Assessment of Uncertainties of Laminar Flame Speed of Premixed Flames as Determined Using a Bunsen Burner at Varying Pressures," *Appl. Energy*, **227**(1), pp. 149–158.
- Ismail, H. K., Ng, H.M., Gan, S., and Lucchinic, T., 2013, "Computational Study of Biodiesel-Diesel Fuel Blends on Emission Characteristics for a Light-Duty Diesel Engine Using OpenFOAM," *Appl. Energy*, **111**, pp. 827–841.
- Hassan, G., Pourkashanian, M., Ingham, D., Ma, L., Newman, P., and Odedra, A., 2013, "Predictions of CO and NOx Emissions From Steam Cracking Furnaces Using GRI2.11 Detailed Reaction Mechanism—A CFD Investigation," *Comput. Chem. Eng.*, **58**(0), pp. 68–83.
- Cao, R. R., and Pope, S. B., 2005, "The Influence of Chemical Mechanisms on PDF Calculations of Nonpremixed Piloted Jet Flames," *Combust. Flame.*, **143**(4), pp. 450–470.
- Wang, Z., Liu, L., Chen, S., and Zheng, C., 2012, "Comparison of Different Global Combustion Mechanisms Under Hot and Diluted Oxidation Conditions," *Combust. Sci. Technol.*, **184**(2), pp. 259–276.
- Zhou, X., Jiang, X., and Martinez, D. M., 2016, "The Effects of Chemical Kinetic Mechanisms on Large Eddy Simulation (LES) of a Nonpremixed Hydrogen Jet Flame," *Int. J. Hydrogen. Energy.*, **41**(26), pp. 11427–11440.
- Davis, S. G., Joshi, A. V., Wang, H., and Egolopoulos, F., 2005, "An Optimized Kinetic Model of H₂/CO Combustion," *Proc Combust Inst.*, **30**(1), pp. 1283–1292.
- Hong, Z., Davidson, D. F., and Hanson, R. K., 2011, "An Improved H₂/O₂ Mechanism Based on Recent Shock Tube/Laser Absorption Measurements," *Combust. Flame.*, **158**(4), pp. 633–644.
- Ó Conaire, M., Curran, H. J., Simmie, J. M., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K., 2004, "A Comprehensive Modelling Study of Hydrogen Oxidation," *Int. J. Chem. Kinet.*, **36**(11), pp. 603–622.
- Boivin, P., Jiménez, C., Sánchez, A. L., and Williams, F. A., 2011, "An Explicit Reduced Mechanism for H₂-Air Combustion," *Proc Combust Inst.*, **33**(1), pp. 517–523.
- Yilmaz, H., Cam, O., Tangoz, S., and Yilmaz, I., 2017, "Effect of Different Turbulence Models on Combustion and Emission Characteristics of Hydrogen/Air Flames," *Int. J. Hydrogen. Energy.*, **42**(40), pp. 25744–25755.
- Khodabandeh, E., Moghadasi, H., Pour, M. S., Ersson, M., Jönsson, P. G., Rosen, M. A., and Rahbari, A., 2020, "CFD Study of Non-Premixed Swirling Burners: Effect of Turbulence Models," *Chin. J. Chem. Eng.*, **28**(4), pp. 1029–1038.
- Yang, B., and Pope, S. B., 1998, "An Investigation of the Accuracy of Manifold Methods and Splitting Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry," *Combust. Flame*, **112**(1–2), pp. 16–32.
- Jones, W. P., and Lindstedt, R. P., 1988, "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion," *Combust. Flame.*, **73**(3), pp. 233–249.
- Emami, M. D., and Eshghinejad Fard, A., 2012, "Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame Using Artificial Neural Networks," *Appl. Math. Model.*, **36**(5), pp. 2082–2093.
- Kashir, B., Tabejamaat, S., and Jalalati, N., 2015, "On Large Eddy Simulation of Blended CH₄-H₂ Swirling Inverse Diffusion Flames: The Impact of Hydrogen Concentration on Thermal and Emission Characteristics," *Int. J. Hydrogen. Energy.*, **40**(45), pp. 1–17.
- Awakem, D., Obounou, M., and Noume, H. C., 2018, "Application of the CSP Method to a Turbulent Diffusion CH₄/H₂/N₂ Flame Using OpenFoam," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(4), p. 042201.
- Noume, H. C., Bomba, V., and Obounou, M., 2020, "Numerical Investigation of a Turbulent Jet Flame With a Compact Skeletal Mechanism," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **142**(3), p. 032206.
- Chelem, M. C., and Groll, R., 2018, "Performance Investigation of an Argon Fueled Magnetoplasmadynamic Thruster With Applied Magnetic Field," *J. Appl. Phys.*, **124**(22), p. 223301.
- Yang, Q., Zhao, P., and Ge, H., 2019, "reactingFoam-SCI: An Open Source CFD Platform for Reacting Flow Simulation," *Comput. Fluids*, **190**, pp. 114–127.
- Gaikwad, P., and Sreedhara, S., 2019, "OpenFOAM Based Conditional Moment Closure (CMC) Model for Solving Non-Premixed Turbulent Combustion: Integration and Validation," *Comput. Fluids*, **190**, pp. 362–373.
- Kassem, H. I., Saqr, K. M., Sies, M. M., and Wahid, M. A., 2012, "Integrating a Simplified P-N Radiation Model With EdmFoam1.5: Model Assessment and Validation," *Int. Commun. Heat Mass Transf.*, **39**(5), pp. 697–704.
- Jones, W. P., and Launder, B. E., 1972, "The Prediction of Laminarization With a Two-Equation Model of Turbulence," *Int. J. Heat. Mass. Transfer.*, **15**(2), pp. 301–314.
- Chen, L., and Battaglia, F., 2017, "The Effects of Inlet Turbulence Intensity and Computational Domain on a Nonpremixed Bluff-Body Flame," *J. Energy Resour. Technol.*, **139**(2), p. 022205, doi:.
- Menter, F. R., Kuntz, M., and Langtry, R., 2003, "Ten Years of Industrial Experience With the SST Turbulence Model," Proceedings of the Fourth International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, Antalya, Turkey, Oct. 12–17, Begell House, pp. 625–632.
- Cokljat, D., Ivanov, V. A., Sarasola, F. J., and Vasquez, S. A., 2000, "Multiphase K-Epsilon Models for Unstructured Meshes," ASME 2000 Fluids Engineering Division Summer Meeting, Boston, MA, June 11–15, Vol. 25, No. 1.
- Shaheed, A., Mohammadian, R., and Gildeh, H. K., 2019, "A Comparison of Standard $k-\varepsilon$ and Realizable $k-\varepsilon$ Turbulence Models in Curved and Confluent Channels," *Environ. Fluid Mech.*, **19**, pp. 543–568.
- Menter, F. R., Langtry, R. B., Likki, S. R., Suzen, Y. B., Huang, P. G., and Volker, S., 2006, "A Correlation Based Transition Model Using Local Variables Part 1—Model Formulation," *ASME J. Turbomach.*, **128**(3), p. 413.
- Wilcox, D. C., 1998, *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries Inc., La Canada, CA.

- [31] Magnussen, B. F., and Hjertager, B., 1981, "On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow," 19th AIAA Aerospace Meeting, St. Louis, MO, Jan. 12–15, Vol. 198.
- [32] Nordin, N., 2001, "Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion," Ph.D. thesis, Department of Thermo and Fluid Dynamics Chalmers, University of Technology, Göteborg.
- [33] Golovitchev, V. I., Nordin, N., Jarnicki, R., and Chomiak, J., 2000, "3-D Diesel Spray Simulations Using a New Detailed Chemistry Turbulent Combustion Model," *J. Fuels Lubr., SAE Int.*, **109**, pp. 1391–1405, Section 4.
- [34] Lu, T., and Law, C. K., 2005, "A Directed Relation Graph Method for Mechanism Reduction," *Proc. Combust. Inst.*, **30**(1), pp. 1333–1341.
- [35] Bomba, V., 2017, "Chemistry Reduction for Laminar Oxyfuel Combustion," Ph.D. thesis, Ruhr University Bochum, Bremen, Germany.
- [36] Lam, S. H., and Goussis, D. A., 1988, "Understanding Complex Chemical Kinetics With Computational Singular Perturbation," *Proc. Combust. Inst.*, **22**, pp. 931–941.
- [37] Du, L., Yu, G., Wang, Z., and Metghalchi, H., 2019, "The Rate-Controlled Constrained-Equilibrium Combustion Modeling of N-Pentane/Oxygen/Diluent Mixtures," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(8), p. 082206.
- [38] Yu, G., Hadi, F., and Metghalchi, H., 2018, "Rate-Controlled Constrained-Equilibrium Application in Shock Tube Ignition Delay Time Simulation," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(2), p. 020801.
- [39] Yu, G., Metghalchi, H., Askari, O., and Wang, Z., 2018, "Combustion Simulation of Propane/Oxygen (With Nitrogen/Argon) Mixtures Using Rate-Controlled Constrained-equilibrium," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(2), p. 022204.
- [40] Peters, N., 1988, "Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion," *Symp. (Int.) Combust.*, **21**(1), pp. 1231–1250.
- [41] Pitsch, H., and Peters, N., 1998, "A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects," *Combust. Flame*, **114**(1–2), pp. 26–40.
- [42] James, S., Anand, M. S., Razdan, M. K., and Pope, S. B., 1999, "In Situ Detailed Chemistry Calculations in Combustor Flow Analyses," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **123**(4), pp. 747–756.
- [43] Correa, S. M., 1993, "Turbulence-Chemistry Interactions in the Intermediate Regime of Premixed Combustion," *Combust. Flame*, **93**(1–2), pp. 41–60.
- [44] Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T., and Ranzi, E., 2009, "Accuracy and Flexibility of Simplified Kinetic Models for CFD Applications," 32nd Annual Meeting of the Italian Section of the Combustion Institute, Naples, France, Apr. 26–28.
- [45] Andersen, J., Rasmussen, C. L., Giselsson, T., and Glarborg, P., 2009, "Global Combustion Mechanisms for Use in CFD Modeling Under Oxy-Fuel Conditions," *Energy Fuels*, **23**(3), pp. 1379–1389.
- [46] Frassoldati, A., Ranzi, E., Candusso, C., and Tolazzi, D., 2009, "Simplified Kinetic Schemes for Oxy-Fuel Combustion," 1st International Conference on Sustainable Fossil Fuels for Future Energy – S4FE 2009, Rome, Italy, July 6–10.
- [47] Bibrzycki, J., and Poinot, T., 2010, "Reduced Chemical Kinetic Mechanisms for Methane Combustion in O₂/N₂ and O₂/CO₂ Atmosphere," Technical Report Cerfacs, Silesian University of Technology, Institute of Thermal Technology, Gliwice, Poland and Université de Toulouse, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, Toulouse, France, Report no. 4.
- [48] Bergmann, W., Meir, V., Wolff, D., and Stricker, W., 1998, "Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame," *Appl. Phys. B: Laser Opt.*, **66**(4), pp. 489–502.

Hermann Chopkap Noume¹

Energy, Electrical and Electronic Systems
Laboratory,
Department of Physics,
Faculty of Sciences,
University of Yaounde I,
P.O. Box 812,
Yaounde, Cameroon
e-mail: noumher@gmail.com

Valentin Bomba

Department of Physics,
Faculty of Sciences,
University of Maroua,
P.O. Box 814,
Maroua, Cameroon
e-mail: bvalo2000@yahoo.ca

Marcel Obounou

Energy, Electrical and Electronic Systems
Laboratory,
Department of Physics,
Faculty of Sciences,
University of Yaounde I,
P.O. Box 812,
Yaounde, Cameroon
e-mail: marcelobounou@yahoo.fr

Numerical Investigation of a Turbulent Jet Flame With a Compact Skeletal Mechanism

The present work assesses the capabilities of a compact skeletal mechanism, derived using an in-house reduction code, to accurately model chemical processes in a turbulent CH₄/H₂/N₂ flame. To this end, a numerical investigation of the DLR-A flame is performed using the free and open-source code OPENFOAM with the derived mechanism. Specifically, the numerical investigation is performed using the Reynolds-averaged Navier–Stokes (RANS) approach and a compact skeletal mechanism consisting of 51 elementary reactions among 21 species. The skeletal mechanism is derived from the GRI3.0 mechanism using an improved multistage reduction method. The $k-\epsilon$ model is used as a closure for the RANS equations, while the source terms in the species and energy transport equations are closed by the partially stirred reactor (PaSR) model. The radiation term is modeled by the P-1 model. The numerical results show a good agreement with the experimental data. [DOI: 10.1115/1.4044556]

Keywords: compact skeletal mechanism, multi-stage reduction, OPENFOAM, partially stirred reactor, Reynolds-averaged Navier–Stokes, turbulent non-premixed flame

1 Introduction

Although computer power has drastically increased during the last two decades, one of the challenges with numerical investigations of industrial combustion systems is the computational cost. Specifically, depending on the model used, the computational cost of combustion investigations can be (i) extremely high, if not prohibitive—this is for instance the case with the so-called direct numerical simulation, (ii) significant if the large Eddy simulation (LES) models are considered, and (iii) moderate or reduced if the Reynolds average numerical simulation (RANS) models are considered. In addition, the computational cost rise drastically if the above-mentioned models are implemented with large detailed mechanisms. The skeletal reduction is one of the strategies to reduce the computational cost of the combustion simulation. For example, some other approaches may include timescale reduction and stiffness removal for explicit solvers. Basically, skeletal reduction methods tailor a starting detailed mechanism such that the final skeletal mechanism contains only important species and elementary reactions for a specific combustion system.

Many methods have been devised to reduce the complexity of chemistry models. Methods such as sensitivity analysis [1–3], path flux analysis [4], rate-controlled constrained-equilibrium (RCCE) [5–7], directed relation graph (DRG) [8–11], DRG-aided sensitivity analysis (DRGASA) [12], DRG with error propagation (DRGEP) [13,14], and DRG with error propagation and sensitivity analysis (DRGEP-SA) [15] are commonly used in the literature to derive skeletal mechanisms. A detailed review of skeletal reduction techniques is given in Tomlin and Turanyi [16]. In the present work, a graph-based method is used as the first reduction technique in the context of the multistage reduction approach. A key advantage of graph-based methods is that they enable the generation of skeletal

mechanism with a specified accuracy [8]. In addition, the overall reduction time with the DRG method for instance is linearly proportional to the number of reactions in the chemical mechanism [9]. Following Lu and Law [9,11] who have shown that a multistage skeletal reduction method leads to a smaller skeletal mechanism compared with one-stage reduction methods such as DRG; in this work, a similar but improved multistage reduction technique [17] is used to derive a compact skeletal mechanism.

Several studies have numerically investigated the so-called DLR-A flame ($Re = 15,200$). For instance, Pitsch [18] investigated a steady turbulent, CH₄/H₂/N₂-air diffusion flame using an unsteady flamelet model with unity Lewis number for all species. He found out that the results predicted by the model using a 20-step reduced mechanism are in reasonable agreement with the experimental data. Emami and Eshghinejad Fard [19] investigated numerically the DLR-A flame using a steady laminar flamelet model with nonunity Lewis number and artificial neural networks (ANNs). They used the GRI3.0 mechanism [20] consisting of 325 reactions among 53 species. The numerical results obtained with the “Flamelet + ANN” model are in good agreement with the experimental data at the axial location $X/D = 5$. However, the quality of the agreement decreases with the axial distance from the burner. Wang and Pope [21] performed LES/PDF simulations of a turbulent CH₄/H₂/N₂ jet flame. Their numerical results reveal an overall good agreement between LES/PDF predictions and the measurement [22,23]. Tabet-Helal et al. [24] investigated the DLR-A flame using the Reynolds stress model coupled with the Eddy dissipation concept (EDC). They used the GRI 1-2 mechanism consisting of 177 elementary reactions among 30 species as the chemistry model. Their numerical predictions match the experimental data for the peak temperature and H₂O mass fraction at the axial location $X/D = 5$. However, numerical results for mass fraction profiles of CO, CO₂ as well as temperature profile are over-estimated in the fuel-lean region at the axial location $X/D = 40$. Awakem et al. [25] applied the computational singular perturbation (CSP) method to DLR-A flame calculations using the free and open-source code OPENFOAM. The flame-structure results obtained with the CSP-based mechanism are in good agreement with data; however, the starting chemical

¹Corresponding author.

Contributed by the Advanced Energy Systems Division of ASME for publication in the JOURNAL OF ENERGY RESOURCES TECHNOLOGY. Manuscript received May 17, 2019; final manuscript received July 25, 2019; published online September 3, 2019. Assoc. Editor: Reza Sheikhi.

mechanism used in their study to derive a reduced chemistry model is short. In the present work, a compact skeletal mechanism is derived using an improved multistage reduction approach, with the GRI3.0 as the starting mechanism. The compact skeletal mechanism is subsequently implemented in the numerical investigation of the DLR-A flame.

2 Chemical Kinetic Approach

Using an in-house reduction code based on an improved multistage reduction approach [17] and the following simplified flamelet equations [26,27]

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + w_k \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^K h_k w_k \quad (2)$$

with the boundary temperature of 292 K and the pressure of 990 mbar as indicated by the experimental data of the DLR-A flame [28].² A compact skeletal mechanism has been derived in the present work. In Eqs. (1) and (2), ρ denotes the mixture mass density, t the time, Z the mixture fraction, and Y_k the mass fraction of species k , $k=1, \dots, K$, where K denotes the number of species in the system. The quantities w_k , h_k , and Le_k are the mass rate of production, enthalpy, and Lewis number, respectively, of species k ; T is the temperature and c_p the mixture mass-based specific heat capacity at constant pressure. The quantity χ denotes the scalar dissipation rate. In the present study, χ is approximated as a function of the mixture fraction [26]

$$\chi \approx \frac{a_\infty}{\pi} \exp\{-2[erfc^{-1}(2Z)]^2\} \quad (3)$$

In Eq. (3), a_∞ denotes the strain rate and $erfc$ the complementary error function. The flamelet equations (1)–(2) are solved using the stiff code LIMEX [29–31].

The multistage reduction technique used in this work consists of four methods, namely, DRG, DRGASA, unimportant reaction elimination, and reaction elimination based on DRGASA. The first three methods have been extensively used in the literature. Details on these methods are given by Lu and Law [8–11] and Zheng et al. [12]. Bomba [17] has reported that the successive application of these three methods does not lead to the smallest possible chemical mechanism. Therefore, the simplified mechanism derived after the successive application of DRG, DRGASA, and unimportant reaction elimination is further reduced using the last reduction method, namely, reaction elimination based on DRGASA. This method perfectly complements the first three methods mentioned above and follows the same procedure as the original DRGASA method [12]. However, while the original DRGASA method is applied for species elimination, the reaction elimination based on DRGASA method is rather used for reaction elimination. Specifically, the reaction elimination based on DRGASA method identifies and eliminates elementary reactions which are not important to any target global parameter. Such reactions can be identified using the sensitivity defined by

$$E_i = \max_{x \in D} \frac{|x - x_0|}{x} \quad (4)$$

where E_i denotes the error induced to target global parameters such as temperature profile due to the elimination of the i th reaction from the starting mechanism, x the value of the target global parameter calculated with the starting mechanism, x_0 the value of the target global parameter calculated with the modified mechanism, and D

is either a temporal or spatial domain. If

$$E_i < \text{User specified threshold} \quad (5)$$

the i th reaction is said to be unimportant and removed from the chemical mechanism. Otherwise, the i th reaction is kept in the mechanism. For instance, using a 10^{-3} user-specified threshold with temperature profile as target global parameter, it is found in the present work that the reaction elimination based on the DRGASA method further reduces the simplified mechanism (obtained after successive application of DRG, DRGASA, and unimportant reaction elimination) by another 41% of elementary reactions.

The implementation of the four-stage reduction approach with the GRI3.0 as the starting mechanism leads to a compact skeletal mechanism consisting of 51 elementary reactions among 21 species, namely, H_2 , H , O , O_2 , OH , H_2O , HO_2 , CH_2 , $CH_2(S)$, CH_3 , CH_4 , CO , CO_2 , HCO , CH_2O , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_5 , C_2H_6 , N_2 , and AR .

3 Geometry Description and Simulation

Figure 1 shows the burner configuration (left) and the characteristics of the inlet flow considered in the present work as well as the computational domain (right) used. The fuel jet consists of a mixture of 22.1% CH_4 , 33.2% H_2 , and 44.7% N_2 by volume and emanates from a stainless steel pipe having an inner diameter of 8 mm with a jet velocity of 42.2 ± 0.5 m/s and surrounded by a low-velocity air coflow of 0.3 m/s. This configuration has a number of Reynolds $Re = 15,200$. Fuel and air temperatures are both 292 K [28]. The pressure is 990 mbar [28].

Following the axisymmetric configuration of the burner, a wedge of length 1 m, 0.2 m radius, and of angle 5 deg is used in this work. The discretization of the computational space of the DLR-A flame was performed by a mesh using 72 nodes in the radial direction and 110 nodes in the axial direction. The inhomogeneously distributed

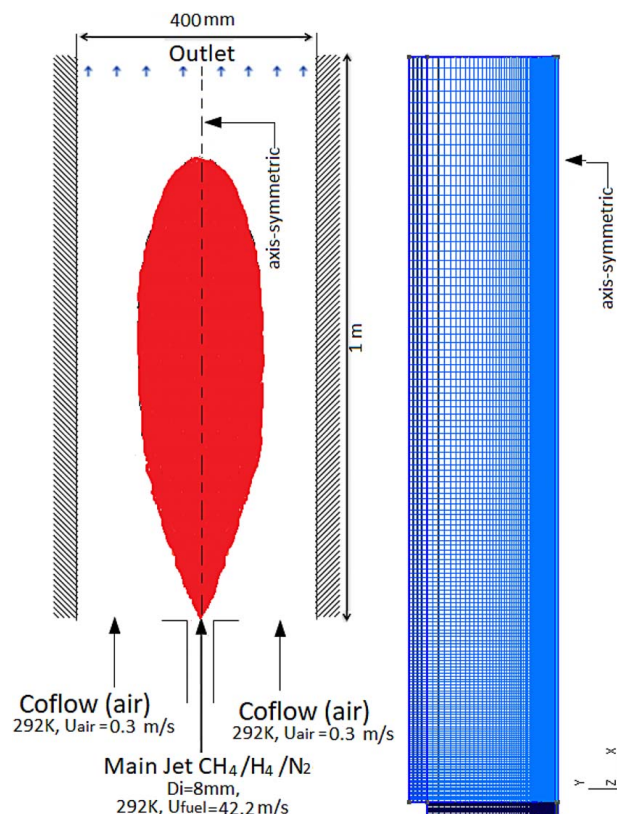


Fig. 1 Burner configuration (left) and 2D view of the computational domain (right)

²<http://www.sandia.gov/TNF/DataArch/DLRflames.html>

nodes are concentrated near the nozzle in the axial and radial directions. This 2D-axisymmetric mesh was generated with the Gmsh code.

In the present work, the reactingFOAM (a solver available in OPENFOAM) solver was used to simulate the DLR-A flame. The OPENFOAM code [32] was selected for simulation purposes because it is a free and open-source code designed for computational fluid dynamic applications, which is attracting a growing attention in both commercial and academic organizations [25,33–36]. The numerical simulation of the flow field includes the solution of the governing equations which consists of Favre-averaged form of continuity, momentum, energy, and species conservation equations. Following the RANS simulation scheme, standard $k-\varepsilon$ and partially stirred reactor (PaSR) are, respectively, used as turbulence and combustion models. The radiative heat transfer of the diffusion flames is calculated by the P-1 model [37]. The calculations were performed using an Intel core i5 desktop with an 8 GB RAM. It took about a week with the skeletal mechanism derived in the present work to obtain statistically convergent results with an execution time per iteration of about 1.79 s. The results are convergent if: (i) either the residual is less than the solver tolerance and (ii) or the ratio of current to initial residuals falls below the solver relative tolerance.

4 RANS Modeling

To obtain the balance equations for the mean quantities, Favre averaging is introduced in the instantaneous balance equations. The simplified RANS governing equations are indicated as follows [38]:

Continuity equation:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (6)$$

Momentum equation:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial (\bar{\rho} u_i'' u_j'')}{\partial x_i} \quad (7)$$

Species transport equation:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \tilde{D}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} u_i'' \tilde{Y}_k'') + \tilde{\omega}_k \quad (8)$$

Sensible enthalpy equation:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} - \bar{\rho} u_i'' h_s'' \right) + \tilde{\omega}_T \quad (9)$$

In Eq. (7), body forces have been neglected. Similarly, in Eq. (8), Soret effect and pressure diffusion are also neglected.

4.1 Turbulence Modeling. The Favre-averaged balance equations (6)–(9) contained unclosed terms such as $\bar{\rho} u_i'' u_j''$, $\bar{\rho} u_i'' \tilde{Y}_k''$, $\tilde{\omega}_k$, or $\bar{\rho} u_i'' h_s''$. These terms are generally modeled in order to close the system of partial differential equations (6)–(9) [38]. For instance, in Eq. (7), following the Boussinesq assumption, the turbulent Reynolds stresses are related to mean velocity gradients. Species $\bar{\rho} u_i'' \tilde{Y}_k''$ and enthalpy $\bar{\rho} u_i'' h_s''$ turbulent fluxes are estimated using a gradient assumption, i.e.,

$$\bar{\rho} u_i'' \tilde{Y}_k'' = -\frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (10)$$

where μ_t denotes the turbulent viscosity and Sc_{kt} a turbulent Schmidt number for species k . In addition, the standard $k-\varepsilon$ turbulence model is used to close RANS equations (6)–(9). In this

approach, the turbulent viscosity is modeled as [39]

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (11)$$

and the balance equations for the turbulent kinetic energy k and the dissipation rate ε are written as [38]

$$\frac{\partial (\bar{\rho} k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right] \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) - \bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \varepsilon \quad (12)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\left[\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right] \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right) + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \varepsilon \right) \quad (13)$$

where σ_k , σ_ε , $C_{\varepsilon 1}$, and $C_{\varepsilon 2}$ are model constants. These model constants take the following values [40,41]: $C_\mu = 0.09$, $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, and $\sigma_\varepsilon = 1.3$.

4.2 Turbulent Combustion Modeling. In the present work, the turbulent-chemistry interaction is modeled by the PaSR approach [42–44]. Similarly to the EDC introduced by Magnussen and Hjertager [45], the PaSR model divides each computational cell into (i) a reacting region—where reactions occur; this part of the cell is treated as a perfectly stirred reactor and (ii) a chemically inert region. The mean reaction rate for the species i is defined as

$$\tilde{\omega}_i = \kappa \dot{\omega}_i \quad (14)$$

where $\dot{\omega}_i$ denotes the laminar reaction rate of species i and κ the reactive fraction; κ is defined as

$$\kappa = \frac{\tau_{ch}}{\tau_{mix} + \tau_{ch}} \quad (15)$$

In Eq. (15), τ_{ch} denotes the chemical timescale and τ_{mix} the mixing timescale. In the present study, the mixing timescale τ_{mix} is estimated as [43,44]

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho \varepsilon}} \quad (16)$$

where C_{mix} is a model constant and $\mu_{eff} = \mu + \mu_t$, with μ the dynamic viscosity and μ_t the turbulent viscosity.

5 Results and Discussion

In this section, the results of the numerical investigation are presented and discussed. These results can be classified into two groups. The first group is concerned by the validation of the derived skeletal mechanism against the starting detailed mechanism, i.e., the GRI3.0 mechanism. The results of the validation stage are shown in Fig. 2. It can be seen from this figure that the skeletal mechanism reproduces with a very good accuracy the features of the GRI3.0 mechanism. Specifically, Fig. 2(a) shows the peak flame temperature as a function of the strain rate. It is seen from this graph that the solid curve obtained with the skeletal mechanism agrees very well with symbols obtained with the GRI3.0 mechanism. In addition, the quenching strain rate $a_q = 1829 \text{ s}^{-1}$ is predicted with an excellent accuracy by the skeletal mechanism. Figures 2(b)–2(d) show the predicted temperature and mass fraction profiles of major species—reactants and combustion products—in the mixture fraction space as obtained with the skeletal and the GRI3.0 mechanisms for a close-to-extinction strain rate of 1600 s^{-1} . It can be seen from these graphs that skeletal mechanism and the GRI3.0 mechanism predictions are in good agreement. A similar good agreement is obtained for key intermediate species such as O, H, and OH (graphs not shown).

The second group of results is related to the RANS computation. These results are shown in Figs. 3–9. Specifically, Fig. 3 shows the

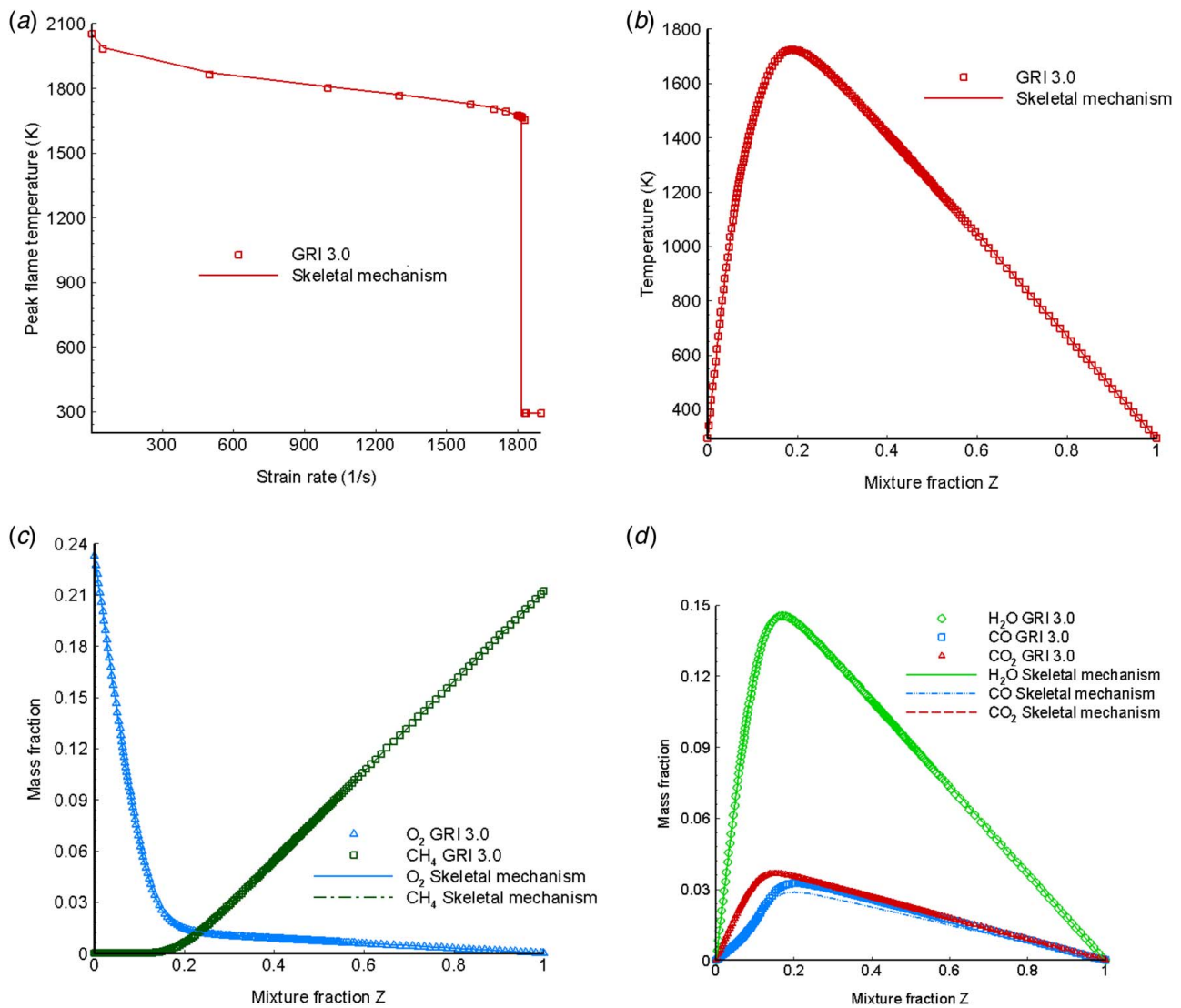


Fig. 2 Validation of the skeletal mechanism against the GRI3.0 mechanism

computed contours of mean temperature. One can see in Fig. 3 that the flame is anchored at the burner nozzle. In addition, the flame is thin near the nozzle and increases with downstream positions. Calculations predict a maximum temperature of 1910 K at the axial position $X/D=62$. These results are in good agreement with the experimental data of the DLR-A flame downloaded on the website of the Sandia Laboratory³ (the measured peak flame temperature is 1842 K; it is located at the axial position $X/D=60$) [28]. It can be noticed that the computation slightly overpredicts the peak flame temperature by 68 K, resulting in a precision of 3.5%.

Shown in Figs. 4–8 are flame-structure results in terms of radial profiles of temperature and selected species mass fraction for the DLR-A flame. In each of these figures, predicted profiles of temperature and mass fraction of species obtained with the compact skeletal mechanism are compared with the data at four axial positions, namely, $X/D=5, 10, 20,$ and 40 . Specifically, Fig. 4 shows a comparison of temperature profiles as obtained with the compact skeletal mechanism and the measurements. It can be seen from the graph that the predicted radial profile of temperature—shape and peak value—matches very well experimental data near the nozzle ($X/D=5$) and the minor discrepancies observed for the peak flame temperature further downstream at

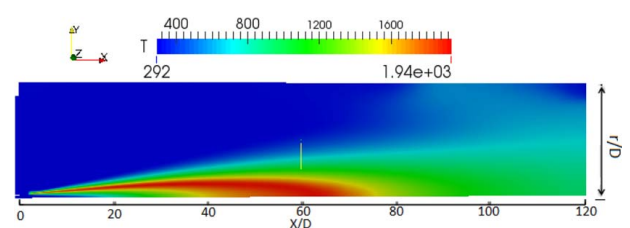


Fig. 3 Computed contours of mean temperature (K)

axial positions $X/D=10, 20,$ and 40 remain within the experimental uncertainty [28].

Measured and predicted mass fraction profiles of H₂O species are shown in Fig. 5. It is seen that the shape and the peak value of the predicted profile agree very well with the measurement. Shown in Fig. 6 is a comparison between measured and predicted mass fraction profiles of CO₂ species. It is seen from this figure that the predicted and the measured mass fraction profile have the same shape; however, the computed profile slightly over-predict the peak value in all the four selected axial positions. A comparison between the measured and computed mass fraction profiles of CO species is shown in Fig. 7. One can see from this figure that although the experimental uncertainty for CO is high (of the order 30% to

³See Note 2.

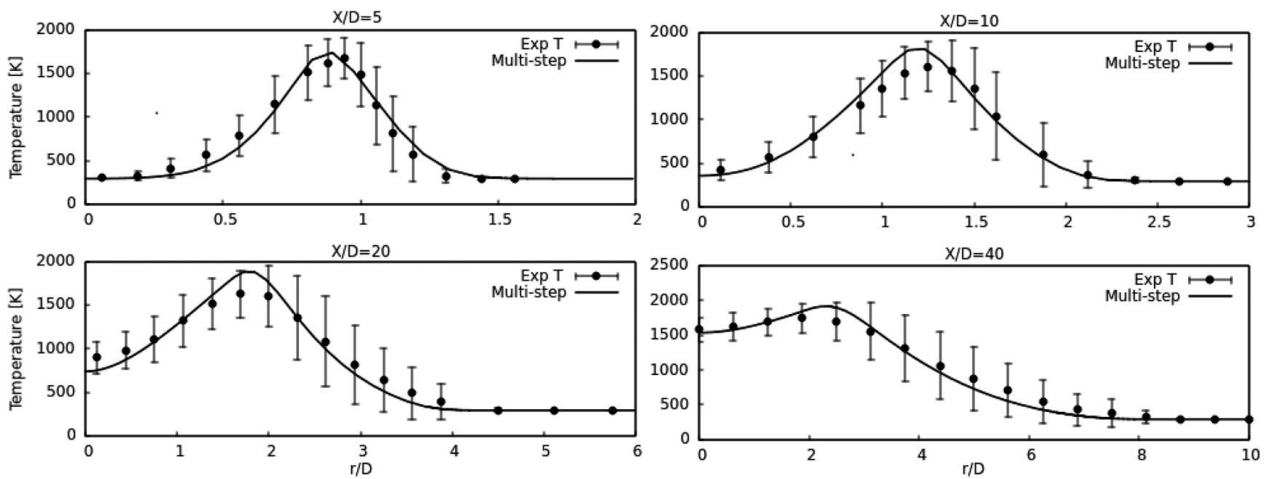


Fig. 4 Radial profiles of temperature at axial positions $X/D = 5, 10, 20,$ and 40 ; experimental (point with error bar) and skeletal mechanism (multistage, full line). RMS values are used to plot the uncertainty bars.

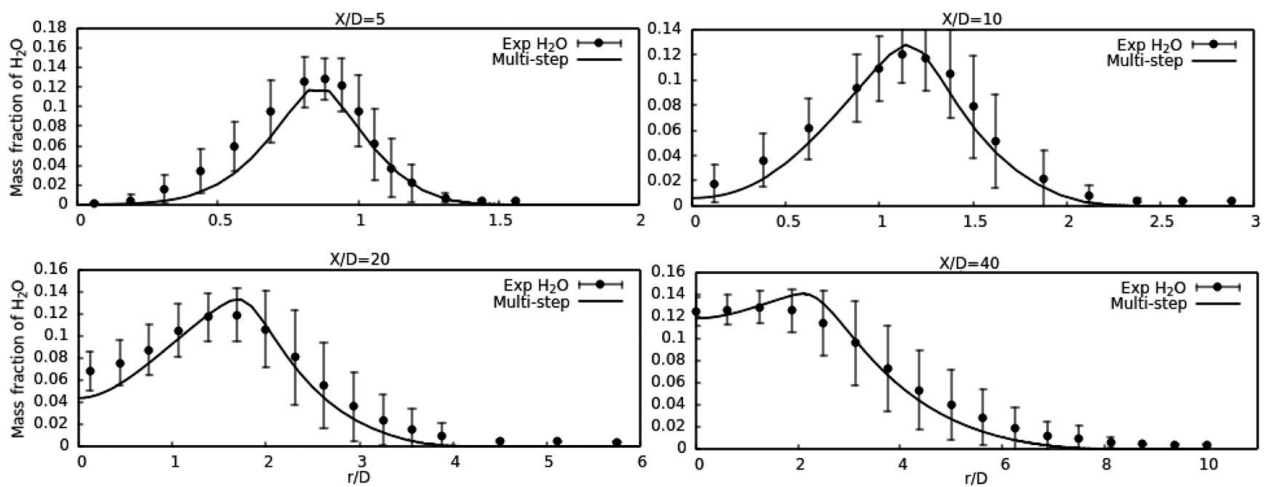


Fig. 5 Radial profile of the mass fraction of the species H_2O , at positions $X/D = 5, 10, 20,$ and 40 ; experimental (point with error bar) and skeletal mechanism (multistage, full line). RMS values are used to plot the uncertainty bars.

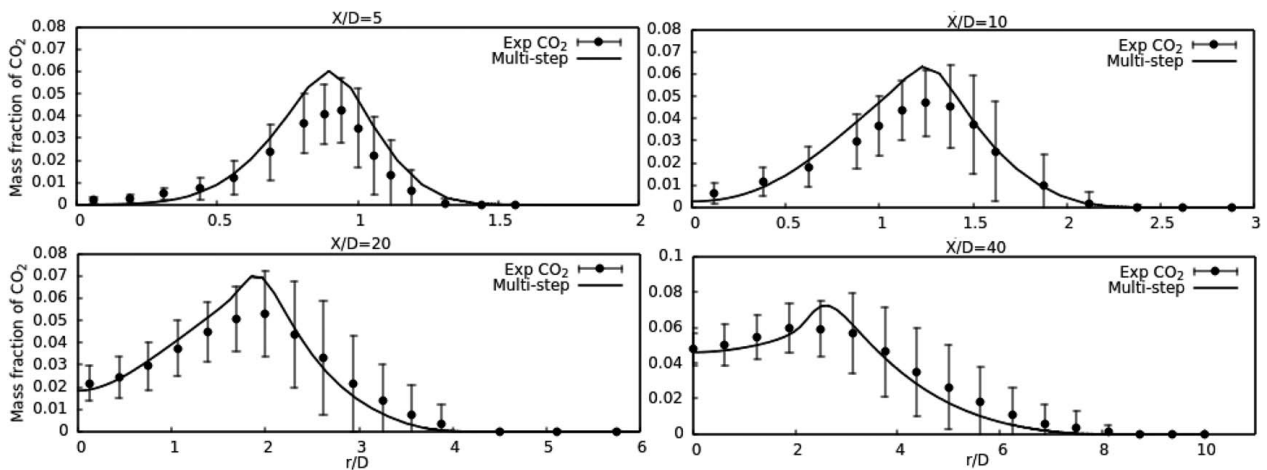


Fig. 6 Radial profile of the mass fraction of the species CO_2 , at positions $X/D = 5, 10, 20,$ and 40 ; Experimental (point with error bar) and skeletal mechanism (multistage, full line). RMS values are used to plot the uncertainty bars.

50%) [28], the skeletal mechanism prediction is in a reasonably good agreement with data. A similar good agreement is obtained for OH species and displayed in Fig. 8.

Figure 9 presents the axial profiles of temperature and mass fraction profiles of major combustion products, namely, species H_2O ,

CO_2 , CO, and OH. It is seen from all these graphs that the predicted profiles obtained with the skeletal mechanism match very well with the experimental data in the laminarization region (from the nozzle up to $X/D = 5$ [22]). In Fig. 9(a), the axial temperature profile computed with the skeletal mechanism agrees very well with

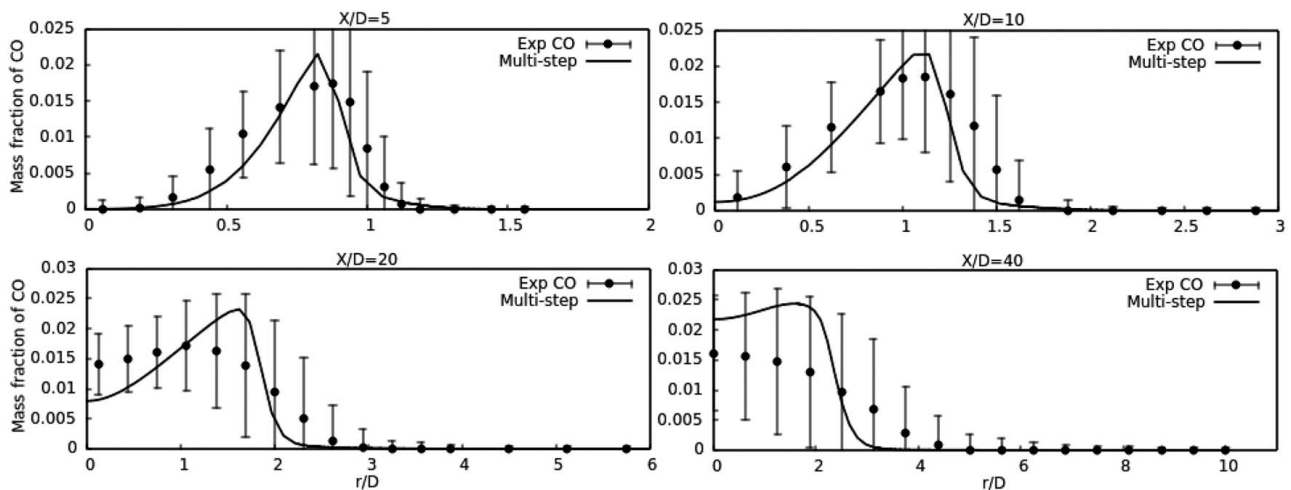


Fig. 7 Radial profile of the mass fraction of the species CO, at positions $X/D = 5, 10, 20,$ and 40 ; experimental (point with error bar) and skeletal mechanism (multistage, full line). RMS values are used to plot the uncertainty bars.

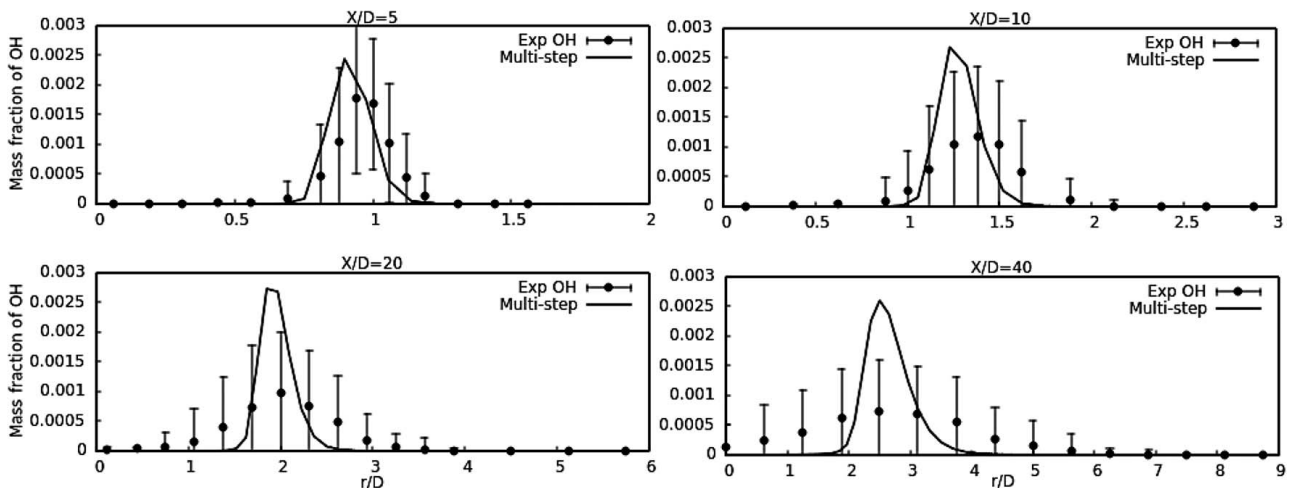


Fig. 8 Radial profile of the mass fraction of the radical species OH, at positions $x/D = 5, 10, 20,$ and 40 ; experimental (point with error bar) and skeletal mechanism (multistage, full line). RMS values are used to plot the uncertainty bars.

experimental data up to the axial position $X/D = 60$. Between $X/D = 60$ and $X/D = 100$, the skeletal mechanism slightly underpredicts the temperature. However, this minor discrepancy remains within the experimental uncertainty. In Fig. 9(b), an overall good agreement is obtained between the computed and the measured mass fraction profiles of H_2O . Here also, minor discrepancies are observed. For instance, the skeletal mechanism underpredicts the peak value of the mass fraction of species H_2O . However, this discrepancy is within measurement uncertainty. A less good agreement is obtained between the measurement and the CO_2 profile computed in the present work; in particular the skeletal mechanism significantly underpredicts the CO_2 mass fraction from the axial position $X/D = 40$ onwards. Of course, taking into consideration, the experimental uncertainty for CO_2 (up to 10%) improves the overall agreement. Similarly, the CO profile computed with the skeletal mechanism does not match the corresponding measurement well. However, a better agreement is obtained if the high experimental uncertainty for CO (of the order 30 to 50% [28]) is considered. It can also be seen in Fig. 9(e) that the computed axial profile of species OH is reproduced correctly, i.e., within the uncertainty given by experimental data [28]. In general, the RANS computation results presented in this section indicate that the compact skeletal mechanism describes with a good accuracy chemical processes in the DLR-A flame.

6 Conclusion and Directions for Future Research

A RANS computation employing the $k-\varepsilon$ turbulence model, the PaSR combustion model and the P-1 radiation model have been performed to simulate the DLR-A flame using a compact skeletal mechanism. The skeletal mechanism, which contains 51 elementary reactions among 21 species, has been derived using the flamelet approach and an improved multistage reduction technique. The skeletal mechanism has been validated against the GRI3.0 mechanism. The validated mechanism is subsequently used to model chemical processes in the DLR-A flame.

Numerical results obtained from the RANS computation are compared with the experimental data. It is found that the flame-structure results in terms of radial or axial profiles of temperature and mass fraction of species agree reasonably well with the experimental data. The discrepancies observed in the shape or the peak values of some profiles are minor and remain in general within the experimental uncertainty. Consequently, the derived skeletal mechanism describes with a good accuracy chemical processes involved in the DLR-A flame.

As future research, other turbulence models such as the Realizable $k-\varepsilon$ or the RNG $k-\varepsilon$ model might be used to investigate the DLR-A flame. In addition, it is possible to derive even a shorter skeletal mechanism by introducing recent reduction

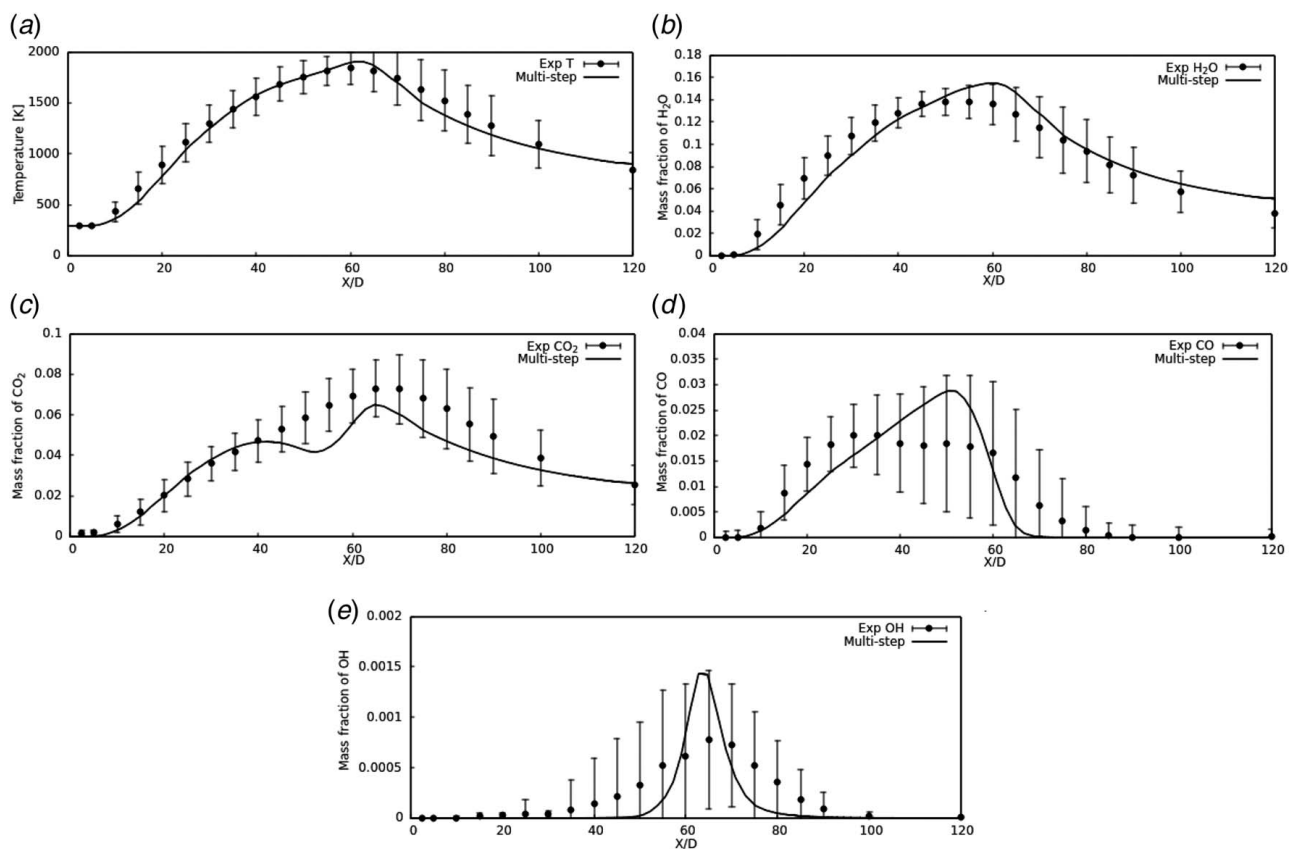


Fig. 9 Axial profile of the temperature and mass fractions of species H_2O , CO_2 , CO , and OH ; experimental (point with error bar) and skeletal mechanism (multistage, full line). RMS values are used to plot the uncertainty bars.

methods such as DRGEP in the multistage reduction procedure. Finally, it could be interesting to consider the LES approach in turbulent diffusion flames investigations.

Nomenclature

k = turbulent kinetic energy
 p = pressure
 t = time
 u = velocity vector
 T = temperature
 Z = mixture fraction variable
 c_p = specific heat capacity at constant pressure
 h_k = enthalpy of species k
 D_k = mean species molecular diffusion coefficient
 Y_k = mass fraction of species k
 Le_k = Lewis number of species k
 Γ = species diffusion coefficient
 ε = turbulent dissipation rate
 λ = fluid conductivity
 μ_t = turbulent viscosity
 ρ = gas mass density
 τ = shear stress tensor
 τ_{ch} = chemical timescale
 τ_{mix} = turbulent mixing timescale
 $\tilde{\phi}$ = Favre-averaged part of ϕ
 ϕ'' = fluctuation part of ϕ
 χ = scalar dissipation rate
 $\dot{\omega}_k$ = mass rate of production of species k
 $\dot{\omega}_T$ = heat source

Abbreviations

DRG = directed relationship graph
 DRGASA = directed relationship graph-aided sensitivity analysis

DRGEP = directed relationship graph with error propagation
 LES = large eddy simulation
 OPENFOAM = open field operation and manipulation
 PaSR = partial stirred reactor
 RAM = random access memory
 RANS = Reynolds-averaged Navier–Stokes
 RNG = renormalization group

References

- [1] Rabitz, H., Kramer, M., and Dacol, D., 1983, "Sensitivity Analysis in Chemical Kinetics," *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **34**(1), pp. 419–461.
- [2] Turanyi, T., 1990, "Sensitivity Analysis of Complex Kinetic Systems," *J. Math. Chem.*, **3**(5), pp. 203–248.
- [3] Tomlin, A. S., and Turanyi, T., 2013, "Investigation and Improvement of Reaction Mechanisms Using Sensitivity Analysis and Optimization," *Development of Detailed Chemical Kinetic Models for Cleaner Combustion*, F. Battin-Leclerc, E. Blurock, J. Simmie, eds., Springer, Heidelberg, pp. 411–445.
- [4] Sun, W. T., Chen, Z., Gou, X. L., and Ju, Y. G., 2010, "A Path Flux Analysis Method for the Reduction of Detailed Chemical Kinetic Mechanisms," *Combust. Flame*, **157**(7), pp. 1298–1307.
- [5] Du, L., Yu, G., Wang, Z., and Metghalchi, H., 2019, "The Rate-Controlled Constrained-Equilibrium Combustion Modeling of N-Pentane/Oxygen/Diluent Mixtures," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(8), p. 082206.
- [6] Yu, G., Hadi, F., and Metghalchi, H., 2018, "Rate-Controlled Constrained-Equilibrium Application in Shock Tube Ignition Delay Time Simulation," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(2), p. 020801.
- [7] Yu, G., Metghalchi, H., Askari, O., and Wang, Z., 2018, "Combustion Simulation of Propane/Oxygen (With Nitrogen/Argon) Mixtures Using Rate-Controlled Constrained-equilibrium," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(2), p. 022204.
- [8] Lu, T., and Law, C. K., 2005, "A Directed Relation Graph Method for Mechanism Reduction," *Proc. Combust. Inst.*, **30**(1), pp. 1333–1341.
- [9] Lu, T., and Law, C., 2006, "Linear Time Reduction of Large Kinetic Mechanisms With Directed Relation Graph: n-Heptane and Iso-octane," *Combust. Flame*, **144**(1–2), pp. 24–36.
- [10] Lu, T., and Law, C. K., 2006, "On the Applicability of Directed Relation Graphs to the Reduction of Reaction Mechanisms," *Combust. Flame*, **146**(3), pp. 472–483.
- [11] Lu, T., and Law, C. K., 2008, "Strategies for Mechanism Reduction for Large Hydrocarbons: N-heptane," *Combust. Flame*, **154**(1–2), pp. 153–163.

- [12] Zheng, X. L., Lu, T. F., and Law, C. K., 2007, "Experimental Counterflow Ignition Temperatures and Reaction Mechanisms of 1,3-Butadiene," *Proc. Combust. Inst.*, **31**(1), pp. 367–375.
- [13] Pepiot, P., and Pitsch, H., 2005, "Systematic Reduction of Large Chemical Mechanisms," Fourth Joint Meeting of the US Sections of the Combustion Institute, Philadelphia, PA, Mar. 20–23.
- [14] Pepiot-Desjardins, P., and Pitsch, H., 2008, "An Efficient Error-Propagation-Based Reduction Method for Large Chemical Kinetic Mechanisms," *Combust. Flame*, **154**(1–2), pp. 67–81.
- [15] Niemeyer, K. E., Sung, C.-J., and Raju, M. P., 2010, "Skeletal Mechanism Generation for Surrogate Fuels Using Directed Relation Graph With Error Propagation and Sensitivity Analysis," *Combust. Flame*, **157**(9), pp. 1760–1770.
- [16] Turanyi, T., and Tomlin, A. S., 2014, *Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [17] Bomba, V., 2017, "Chemistry Reduction for Laminar Oxyfuel combustion," Ph.D. thesis, Ruhr University Bochum, Bremen, Germany.
- [18] Pitsch, H., 2000, "Unsteady Flamelet Modeling of Differential Diffusion in Turbulent Jet Diffusion Flames," *Combust. Flame*, **123**(3), pp. 358–374.
- [19] Emami, M. D., and Eshghinejad Fard, A., 2012, "Laminar Flamelet Modeling of a Turbulent $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ Jet Diffusion Flame Using Artificial Neural Networks," *Appl. Math. Model.*, **36**(5), pp. 2082–2093.
- [20] Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Oriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner Jr, W. C., Lissianski, V. V., and Qin, Z., 1999, GRI-Mech 3.0, <http://www.combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>
- [21] Wang, H., and Pope, S. B., 2011, "Large Eddy Simulation/Probability Density Function Modeling of a Turbulent $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ Jet Flame," *Proc. Combust. Inst.*, **33**(1), pp. 1319–1330.
- [22] Meier, W., Barlow, R. S., Chen, Y.-L., and Chen, J.-Y., 2000, "Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence–Chemistry Interaction," *Combust. Flame*, **123**(3), pp. 326–343.
- [23] Schneider, Ch., Dreizler, A., and Janicka, J., 2003, "Flow Field Measurements of Stable and Locally Extinguishing Hydrocarbon-Fuelled Jet Flames," *Combust. Flame*, **135**(1–2), pp. 185–190.
- [24] Tabet-Helal, F., Sarh, B., and Gökalp, I., 2007, "Numerical Investigation of a Turbulent Diffusion CH_4/H_2 Flame," *Renewable Energy Rev.*, **10**(2), pp. 173–180.
- [25] Awakem, D., Obounou, M., and Noume, H. C., 2018, "Application of the CSP Method to a Turbulent Diffusion $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ Flame Using OpenFoam," *ASME J. Energy Resour. Technol.*, **141**(4), p. 042201.
- [26] Pitsch, H., and Peters, N., 1998, "A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects," *Combust. Flame*, **114**(1–2), pp. 26–40.
- [27] Peters, N., 1988, "Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion," *Symp. (Int.) Combustion*, **21**(1), pp. 1231–1250.
- [28] Bergmann, V., Meir, W., Wolff, D., and Stricker, W., 1998, "Application of Spontaneous Raman and Rayleigh Scattering and 2D LIF for the Characterization of a Turbulent $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ Jet Diffusion Flame," *Appl. Phys. B : Laser Opt.*, **66**(4), pp. 489–502.
- [29] Deuffhard, P. A., 1974, "Modified Newton Method for the Solution of Ill-Conditioned Systems of Nonlinear Equations With Application to Multiple Shooting," *Numerische Mathematik*, **22**(4), pp. 289–315.
- [30] Deuffhard, P., Hairer, E., and Zguck, J., 1985, "One-Step and Extrapolation Methods for Differential-Algebraic Systems," Technical Report Preprint No. 318, Universität Heidelberg Sonderforschungsbericht 123, Heidelberg.
- [31] Deuffhard, P., and Nowak, U., 1985, "Extrapolation Integrators for Quasilinear Implicit ODEs," Technical Report Preprint No. 332, Universität Heidelberg Sonderforschungsbericht 123, Heidelberg.
- [32] Christopher, J., and Greenshields, CFD Direct Ltd, 2015, "OpenFOAM 2.4.0 User Guide," OpenFOAM Foundation Ltd., Gothenburg, Sweden.
- [33] Lamas, M. I., and Rodriguez, C. G., 2017, "Numerical Model to Analyze NOx Reduction by Ammonia Injection in Diesel-Hydrogen Engines," *Int. J. Hydrogen. Energy*, **42**(41), pp. 26132–26141.
- [34] Lamas, M. I., Rodriguez, J. D., Castro-Santos, L., and Carral, L. M., 2019, "Effect of Multiple Injection Strategies on Emissions and Performance in The Wärtsilä 6L 46 Marine Engine. A Numerical Approach," *J. Cleaner. Prod.*, **206**(Jan.), pp. 1–10.
- [35] Chelem, M. C., 2018, "Numerical Investigation of MPD Thrusters Using Density-Based Method With Semi-Discrete Central-Upwind Schemes for MHD Equations," Ph.D. thesis, University Bremen, Bremen, Germany.
- [36] Chelem, M. C., and Groll, R., 2018, "Performance Investigation of An Argon Fueled Magnetoplasmadynamic Thruster With Applied Magnetic Field," *J. Appl. Phys.*, **124**(22), pp. 223301.
- [37] Kassem, H. I., Saqr, K. M., Sies, M. M., and Wahid, M. A., 2012, "Integrating a Simplified P-N Radiation Model With EdmFoam1.5: Model Assessment and Validation," *Int. Commun. Heat Mass Transf.*, **39**(5), pp. 697–704.
- [38] Poinso, T., and Veynante, D., 2001, *Theoretical and Numerical Combustion*, 2nd ed., pp. 140–146.
- [39] Jones, W. P., and Launder, B. E., 1972, "The Prediction of Laminarization With a 2-Equation Model of Turbulence," *Int. J. Heat. Mass. Transfer.*, **15**(2), pp. 301–314.
- [40] Jones, W. P., and Whitelaw, J. H., 1982, "Calculation Methods for Reacting Turbulent Flow: A Review," *Combust. Flame*, **48**, pp. 1–26.
- [41] Launder, B. E., and Spalding, D. B., 1974, "The Numerical Computation of Turbulent Flows," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **3**(2), pp. 269–289.
- [42] Karlsson, J. A. J., 1995, "Modeling Auto-Ignition, Flame Propagation and Combustion in Non-stationary Turbulent Sprays", Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg.
- [43] Chomiak, J., and Karlsson, A., 1996, "Flame Liftoff in Diesel Sprays," *Symp. (Int.) Combustion*, **26**(2), pp. 2557–2564.
- [44] Nordin, N., 2001, "Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion," Ph.D. thesis, Department of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Göteborg.
- [45] Magnussen, B. F., and Hjertager, B., 1981, "On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow," 19th AIAA Aerospace Meeting, Vol. 198, St. Louis.