

SCIENCE

Denis Veynante
 Centre de Recherche sur
 la Combustion
 Turbulente
 Laboratoire E.M2.C.,
 C.N.R.S. Ecole Centrale
 de Paris
 92295 Châtenay
 Malabry CEDEX,
 France



Modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente : exemples, challenges et perspectives

La combustion est aujourd'hui un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Elle est utilisée dans des nombreux systèmes pratiques aussi bien pour produire de la *chaleur* (chaudières ou fours domestiques et industriels), de *l'électricité* (centrales thermiques), que pour le transport (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs fusées, ...) ou encore la *destruction de déchets* (incinérateurs). La combustion peut être caractérisée comme une (ou des) réaction(s) irréversible(s) fortement exothermique(s) entre un combustible et un comburant (ou oxydant) selon le schéma global :



Plus précisément, cette réaction induit un fort dégagement de chaleur dans une zone très mince (les épaisseurs typiques de flamme sont de l'ordre de 0.1 à 1 mm) conduisant à des gradients thermiques très élevés (le rapport des températures entre réactifs et produits de combustion est couramment de 6 à 8) et à de larges variations de la masse volumique. Le taux de réaction est raide et fortement non linéaire (loi d'Arrénius).

Les combustibles les plus divers, gazeux, liquides ou solides, peuvent être utilisés : bois, charbon, hydrocarbures (méthane, butane, propane, essence, gasoil, kérosène, fioul, ...), hydrogène, ... Le comburant est généralement l'oxygène de l'air, plus exceptionnellement de l'oxygène pur (moteurs-fusée, certains fours industriels) qui permet d'atteindre des températures plus élevées et d'éviter le stockage d'azote inerte mais pose des problèmes de sécurité. Plus rarement, d'autres comburants sont utilisés (moteurs fusée pyrotechniques).

Différents mécanismes de couplage interviennent en combustion. Les *schémas cinétiques* de la réaction chimique déterminent le taux de consommation du combustible, la formation de produits de combustion et d'espèces polluantes. Ils interviennent aussi dans les processus d'allumage, de stabilisation ou d'extinction des flammes¹. Les *transferts de masse*, par diffusion moléculaire ou transport convectif, des différentes espèces chimiques sont aussi des éléments importants des processus de combustion. Le dégagement d'énergie dû à la réaction chimique induit des *transferts thermiques* intenses par conduction, convection ou rayonnement, tant au sein de l'écoulement qu'avec son environnement (parois du brûleur, etc.). Cette énergie thermique est ensuite soit utilisée directement, soit convertie en énergie mécanique dans des turbines à gaz ou des moteurs à piston. Bien évidemment, la combustion gazeuse requiert la description de l'écoulement (*mécanique des fluides*). Dans certains systèmes, d'autres aspects sont à considérer. Deux (combustible ou comburant liquide) ou trois (combustible solide, particules) phases peuvent intervenir. Des phénomènes tels que la formation de sprays, la vaporisation, la combustion de gouttes,... doivent alors être

(1) La combustion des hydrocarbures fait intervenir plusieurs centaines d'espèces et plusieurs milliers de réactions. L'incorporation de tels schémas est possible dans le calcul de flammes laminares mono dimensionnelles mais, aujourd'hui encore, complètement exclue, pour les flammes turbulentes.

pris en compte. La formation de suies génère des particules de carbone qui seront ensuite transportées par l'écoulement.

Deux situations génériques idéales, schématisée sur la figure 1, ont été identifiées, selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs dans le foyer. Dans les *flames prémélangées*, les réactifs, combustible et comburant, sont mélangés avant la zone de réaction. Au contraire, dans les *flames non-prémélangées* ou *de diffusion*, les réactifs sont introduits séparément, de part et d'autre de la flamme et sont alors essentiellement entraînés l'un vers l'autre par diffusion moléculaire.

Fig. 1

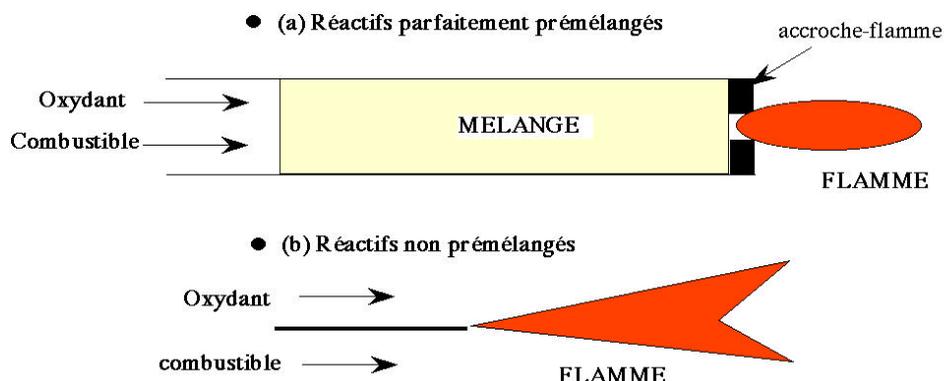


Fig.1 – Flamme prémélangée (a) et flamme de diffusion (b).

La combustion prémélangée est, a priori, plus efficace puisque les réactifs sont déjà en contact avant la combustion. Mais, une telle flamme est susceptible de se propager dans le mélange combustible / oxydant jusqu'à l'endroit où s'effectue le mélange, ce qui pose des problèmes de sécurité. En revanche, si la flamme de diffusion requiert l'apport des réactifs à la zone de réaction par diffusion moléculaire, elle ne peut en aucun cas remonter l'écoulement et est donc plus sûre. Sa réalisation pratique est aussi plus simple puisqu'elle ne nécessite pas un mélange des réactifs dans des proportions bien définies (c'est-à-dire dans les limites d'inflammabilité du combustible). Un brûleur non prémélangé est souvent simplement constitué, par exemple, d'un injecteur de combustible dans de l'air ambiant ou d'un ou plusieurs groupes d'injecteurs de combustible et de comburant (moteurs-fusée, fours, ...).

La combustion intervenant généralement en milieu gazeux, quatre situations génériques, résumées sur la figure 2, sont identifiables, selon que l'écoulement est laminaire ou turbulent et les réactifs prémélangés ou non. En pratique, la combustion a le plus souvent lieu au sein d'écoulements turbulents où les transferts sont plus intenses qu'en écoulement laminaire. La principale difficulté réside alors dans l'interaction entre l'écoulement turbulent et le dégagement de chaleur qui met en jeu une large gamme d'échelles caractéristiques :

Fig.2 – Systèmes pratiques de combustion classés selon le type d'introduction des réactifs (prémélangés ou non) et la nature laminaire ou turbulente de l'écoulement. Les turbines à gaz sont utilisées dans les réacteurs aéronautiques et pour la production d'électricité.

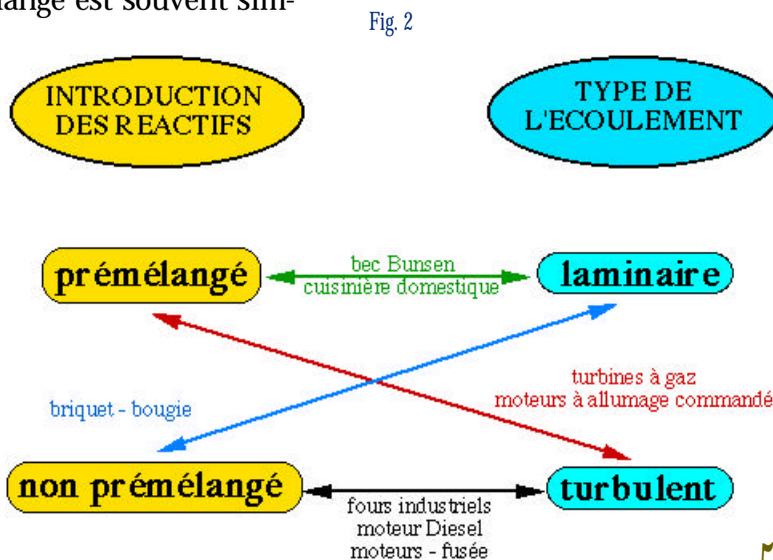


Fig.3 – Comparaison entre simulation numérique directe (DNS), résolution des équations moyennées (RANS) et simulations aux grandes échelles (LES). A gauche, évolution temporelle d'un signal de température. A droite, représentation spectrale où k_c est le nombre d'onde de coupure de la LES.

échelles spatiales et temporelles de la turbulence et des réactions chimiques. Les rapports de ces échelles dépendent d'ailleurs fortement des aspects étudiés. Ainsi, le temps caractéristique de l'oxydation du combustible est généralement court comparé aux échelles des phénomènes turbulents. En revanche, la formation des espèces polluantes (oxydes d'azote en particulier) demande des temps caractéristiques sensiblement plus longs.

L'objectif des recherches en combustion turbulente est principalement de mieux comprendre les phénomènes complexes qui entrent en jeu pour pouvoir les modéliser car l'objectif final est la simulation numérique complète d'un système industriel. En effet, les coûts de développement d'un prototype, qu'il s'agisse d'un moteur automobile ou d'un réacteur d'aviation, sont extrêmement lourds. Ils pourraient être sensiblement réduits en optimisant par simulation numérique un foyer avant de construire un prototype aussi proche que possible du produit final. Cette optimisation peut se faire selon différents critères suivant la destination finale du produit : rendement maximal, moindres émissions polluantes, etc... Il s'agit aussi d'éviter, ou de contrôler, l'apparition d'instabilités de combustion (couplage entre hydrodynamique de l'écoulement, dégagement de chaleur et champ acoustique qui conduit à de fortes oscillations des caractéristiques du système, augmentant bruits et transferts de chaleur et pouvant conduire à une destruction rapide de l'installation). A l'heure actuelle, si certaines tendances sont bien reproduites par les calculs, des simulations numériques vraiment prédictives sont encore loin d'être disponibles.

Références

[1] T. Poinso. Using direct numerical simulations to understand premixed turbulent combustion. In *Twenty-sixth Symposium (International) on Combustion*, pages 219 - 232. The Combustion Institute, 1996.

[2] T. Poinso, A. Trouvé, and S. Candel. Applications of direct numerical simulations of premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 21:531 - 576,1996.

[3] T. Baritaud, T. Poinso, and M. Baum. *Direct numerical simulation for turbulent reacting flows*. Editions TECHNIP, 1996.

[4] L. Vervisch and T. Poinso. Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flames. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 30:655 - 691, 1998.

Trois approches principales (Fig. 3), ont été proposées pour la simulation des écoulements turbulents, réactifs ou non. Historiquement la plus ancienne, la résolution des équations moyennées (RANS pour Reynolds Averaged Navier Stokes equations) se contente de décrire le comportement moyen de l'écoulement mais nécessite la modélisation de tous les effets instationnaires.

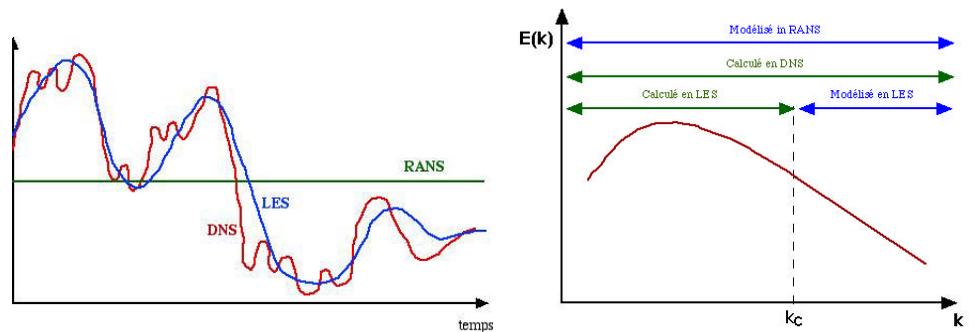


Fig. 3

Au contraire, la simulation numérique directe (Direct Numerical Simulation, ou DNS) consiste à calculer explicitement toutes les structures de l'écoulement sans modélisation autre que le choix d'un schéma cinétique et la description du transport moléculaire [1, 2, 3, 4]. Malheureusement, cette approche est numériquement extrêmement coûteuse (la qualité des résultats ne doit pas être oblitérée par la dif-

fusion numérique du code de calcul) et limitée à de faibles nombres de Reynolds (qui contrôlent la gamme des tailles de structures présentes dans l'écoulement). Cette approche est donc restreinte à des situations académiques simples, malgré la puissance des machines disponibles aujourd'hui, mais constitue un outil irremplaçable pour étudier précisément certains phénomènes fondamentaux et aider au développement de modèles.

Relativement récente, la simulation aux grandes échelles (ou LES pour Large Eddy Simulation) apparaît comme intermédiaire entre RANS et DNS [5, 6, 7] : il s'agit de calculer complètement les plus grandes structures turbulentes présentes dans l'écoulement, comme en DNS, tandis que, seul, l'effet des plus petites structures est modélisé comme en RANS. Clairement plus coûteuse que le RANS (il faut calculer un écoulement instationnaire, tri-dimensionnel, en renonçant aux simplifications usuelles du RANS telles que symétrie, bidimensionnalité,...), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe (seules les structures calculées ont besoin d'être résolues). L'échelle de coupure est, en principe, choisie dans la zone inertielle du spectre de turbulence, en raison des hypothèses faites pour développer les modèles. L'impact des modèles sur le résultat final est, logiquement, moindre qu'en RANS.

Avantages et inconvénients des différentes approches sont résumés Table 1.

Approche	Avantages	Inconvénients
RANS	- « faible » résolution requise - simplification (2D — symétrie) - « faible » coût numérique	- écoulement moyen - modélisation
LES	- instationnaire - impact de la modélisation	- modélisation - calculs tri-dimensionnels - précision numérique - coûts numériques
DNS	- pas de modèle - outil d'étude	- coûts numériques énormes - problèmes académiques

Table 1: Avantages et inconvénients des approches RANS, LES et DNS pour la simulation numérique des écoulements turbulents, réactifs ou non.

Compte tenu de la complexité des foyers industriels et des performances malgré tout limitées des ordinateurs les plus puissants, la simulation numérique prédictive de systèmes réels requiert la modélisation des phénomènes intervenant dans la combustion turbulente. Cette approche, bien connue pour la simulation des écoulements turbulents, est ici compliquée par la présence de la combustion. La démarche employée peut alors se résumer (Fig. 4) en plusieurs phases :

- la *compréhension des phénomènes* repose à la fois sur des expériences fondamentales simples, sur l'étude numérique des flammes laminaires, incorporant les effets les plus complexes (cinétique chimique détaillée, rayonnement, etc.) et sur la simulation numérique directe, qui permet de simuler sans modélisation des situations simples, en accédant à des grandeurs quasiment impossibles à mesurer et d'isoler certains phénomènes particuliers.

[5] U. Piomelli and J.R. Chasnov. Large eddy simulations: theory and applications. In H. Hallbeck, D.S. Henningson, A.V. Johansson, and P.H. Alfredsson, editors, *Turbulence and Transition Modelling*, pages 269 - 336. Kluwer Academic Publishers, 1996.

[6] P. Sagaut. *Introduction la simulation des grandes échelles pour les écoulements de fluide incompressible. Mathématiques et Applications*. Springer Verlag, 1998.

[7] C. Meneveau and J. Katz. Scale-invariance and turbulence models for large eddy simulation. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 32:1-32, 2000.

Fig. 4

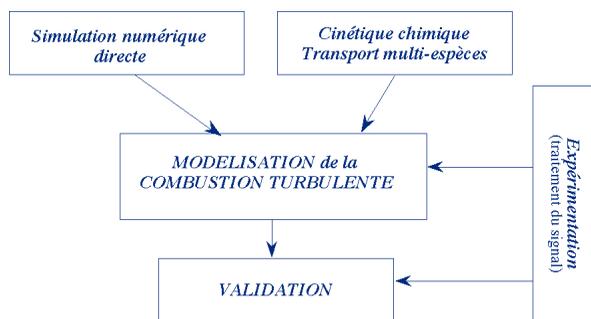


Fig. 4 – Démarche pour modéliser la combustion turbulente.

Fig. 5 – Simulation numérique directe de l'interaction flamme / turbulence. Le champ de vorticit  (traits fins en couleurs) est superpos  au taux de r action (traits  pais noirs). La flamme s pare les gaz frais (  gauche) des gaz br l s o  la turbulence a  t  dissip e par l'augmentation de la viscosit  due   la temp rature. Malgr  la m me turbulence initiale, la flamme  paissit d'un facteur 5, (figure de droite),   une surface et un taux de r action moindre que la flamme r elle (figure de gauche). Code NTMIX, sch ma de Pade du 6^e ordre pour la discr tisation spatiale, Runge-Kutta du 3^e ordre pour la discr tisation temporelle, adapt  aux machines vectorielles (C90, VPP, SX-5).

[8] T.D. Butler and P.J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *Sixteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 1503 - 1515. The Combustion Institute, 1977.

- *l'analyse th orique* permet notamment d' tudier analytiquement quelques probl mes simples dans certains cas limites (analyse asymptotique). Limit e   quelques cas particuliers, elle permet de mettre en  vidence des facteurs d' chelle (nombres sans dimension) et de quantifier le poids relatif de diff rents ph nom nes.
- *la mod lisation* proprement dite propose des fermetures pour les termes inconnus des  quations exactes. Cette  tape fait la synth se des informations acquises pr c demment avant d'incorporer les fermetures propos es dans un code de simulation num rique d' coulements r actifs turbulents.

- *la validation*. Il s'agit cette fois,   partir d'exp riences plus proches des foyers industriels (et mieux instrument es que ces derniers), de valider les mod les propos s en comparant r sultats exp rimentaux et pr dictions num riques. L' tape ultime de ce processus est la validation sur un foyer r el.

Ce d coupage est formel : en r alit , la mod lisation de la combustion turbulente est un incessant va et vient entre la r flexion pour analyser et perfectionner les mod les, l'incorporation de ces mod les dans des codes de calcul, l'obtention de donn es exp rimentales et enfin la comparaison entre r sultats exp rimentaux et num riques.

Quelques  tapes de ce processus sont illustr es ici en d crivant le d veloppement r cent d'un mod le pour la simulation aux grandes  chelles de la combustion turbulente pr m lang e.

L'une des difficult s de la simulation LES pour les  coulements r actifs r side dans la faible  paisseur de la zone de r action : l'essentiel de la combustion intervient   des  chelles trop fines pour  tre r solues dans un calcul LES, sous peine d'un co t calcul prohibitif. Une solution simple consiste   calculer une flamme artificiellement  paissie, qui peut alors  tre num riquement r solue. Obtenir une flamme pr m lang e plus  paisse que la flamme r elle mais qui br le   la m me vitesse est facile, au moins dans le cas d'une situation simple, stationnaire, unidimensionnelle : il suffit d'augmenter les diffusivit s mol culaires et de r duire dans les m mes proportions les taux de r action [8]. Malheureusement, cette solution modifie sensiblement l'interaction turbulence / combustion, comme le montrent les simulations num riques directes de la figure 5 : plus la flamme est  paisse, relativement   la taille des structures turbulentes, moins elle est sensible   l'action de ces derni res.

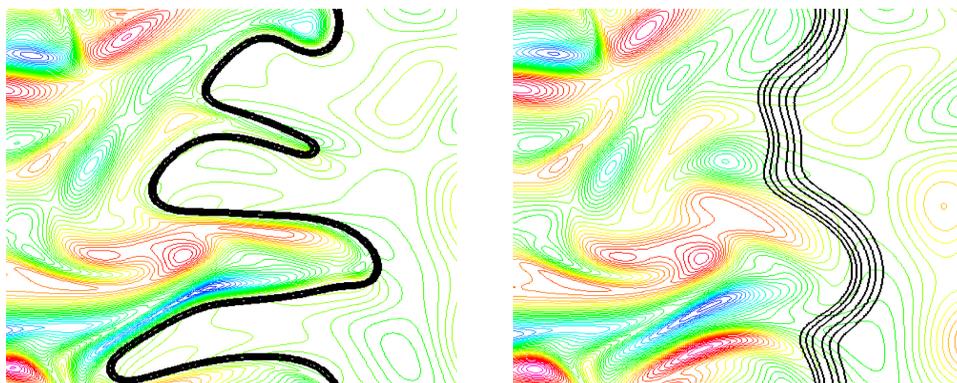
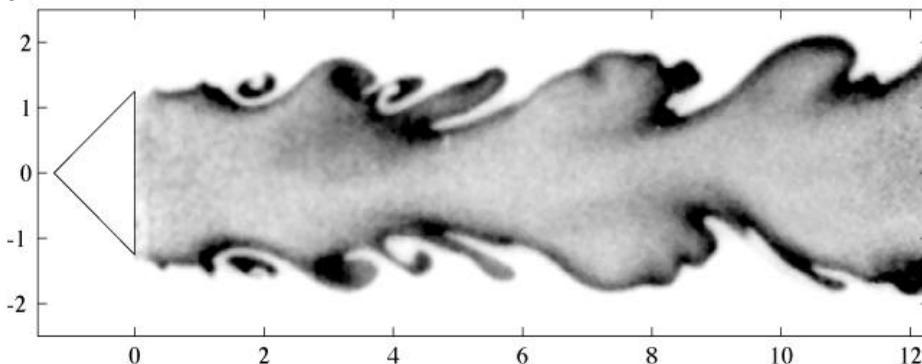


Fig. 5

Ce phénomène a été étudié et quantifié à partir de simulations directes de l'interaction d'une paire de tourbillons contrarotatifs, utilisée comme « maillon élémentaire » de la turbulence, avec une flamme prémélangée initialement plane. Ces résultats, combinés à une description théorique de la turbulence, ont permis de développer un modèle pour décrire l'interaction flamme / turbulence avec une flamme artificiellement épaissie [9].

Ce modèle est implanté dans un code de calcul de type « industriel », c'est-à-dire capable de traiter des géométries complexes (ici, le code AVBP, conjointement développé par le CERFACS à Toulouse et l'Université d'Oxford, non-structuré, multiblocs, maillages hybrides. Il est adapté aux architectures massivement parallèles dont le Cray T3E). Une flamme turbulente prémélangée propane / air stabilisée en aval d'un dièdre est ensuite simulée. Des données expérimentales sont disponibles sur cette configuration étudiée au laboratoire E.M2.C., comme le montre la figure 6.

Fig. 6



Le traitement de ces images permet d'estimer le taux de réaction local instantané, ainsi que le taux de réaction tel qu'il serait résolu dans un calcul LES et la contribution à petites échelles qu'il aurait fallu modéliser. La comparaison des résultats expérimentaux avec les simulations est alors possible comme le fait la figure 7 dans le cas de la même flamme soumise à une excitation acoustique (cette simulation constitue une étape préliminaire indispensable vers la prédiction des instabilités de combustion). Le détachement de structures tourbillonnaires est bien reproduit par le calcul (comparaison des figures 7a et 7b). En revanche, une analyse soignée montre que les contributions non résolues, modélisées dans le calcul (Fig. 7c), diffèrent sensiblement des résultats expérimentaux (Fig. 7d), en raison d'une déficience du modèle de turbulence. Si ce décalage n'affecte pas l'écoulement moyen, il est néanmoins fâcheux pour la description d'instabilités de combustion car il induit un déphasage entre les taux de réaction prédits et mesurés. Cet exemple montre clairement que la validation de simulations LES n'est possible qu'en regard de données expérimentales précises.

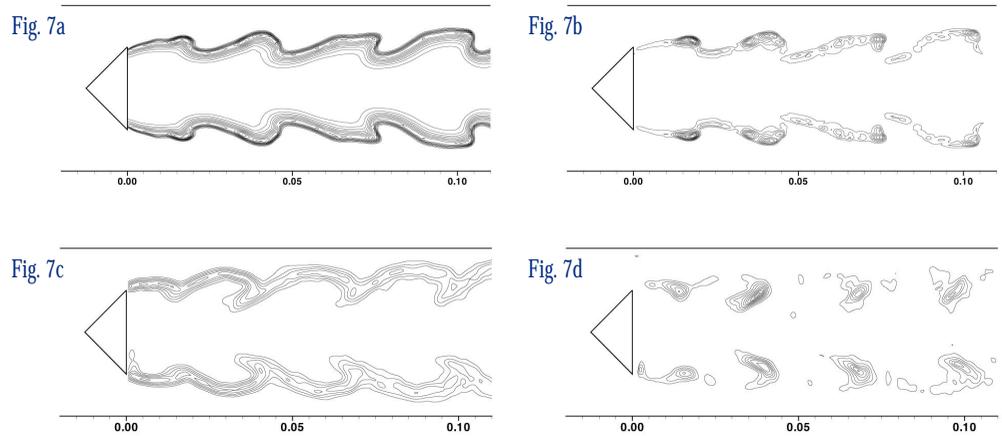
En effet, un tel décalage n'aurait pas été mis en évidence en se contentant de comparer champs moyens mesurés et calculés. Challenge pour le modélisateur et le numéricien, la simulation aux grandes échelles l'est aussi pour l'expérimentateur !

Fig.6 – Visualisation par fluorescence induite par laser du radical OH, intermédiaire de réaction, dans une flamme turbulente prémélangée propane/air stabilisée en aval d'un dièdre (écoulement de la gauche vers la droite). Cette configuration simple est représentative d'un foyer aéronautique ou d'un brûleur industriel. La zone de réaction peut être assimilée à la zone de gradient maximal du radical OH. Expérience conduite par R. Knikker.

[9] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids A*, 12(7):1843 - 1863, 2000.

[10] C. Nottin, R. Knikker, M. Boger, and D. Veynante. Large eddy simulations of an acoustically excited turbulent premixed flame. In *Twenty-eighth Symposium (International) on Combustion*, Edimburgh, 2000.

Fig.7 – Comparaison expérience / simulations LES d'une flamme turbulente prémélangée stabilisée en aval d'un dièdre, soumise à une excitation acoustique pour une phase donnée de l'excitation acoustique. A gauche, simulations numériques : (a) taux de réaction total, (b) contribution modélisée. A droite, mesures expérimentales : (c) taux de réaction total, (d) contribution non résolue qui doit être modélisée [10].



Bien qu'encore largement perfectible, la simulation aux grandes échelles a déjà permis d'obtenir des résultats très encourageants vers la prédiction de la combustion turbulente. La figure 8 montre un exemple de champ instantané de température et de taux de réaction calculé par simulations aux grandes échelles pour une expérience inspirée d'un stato-réacteur industriel. Deux écoulements pré mélangés propane / air sont injectés latéralement de part et d'autre d'une chambre de combustion. Les champs moyens de température et de taux de réaction obtenus par moyenne de champs similaires à ceux de la figure 8 mettent en évidence deux zones de réaction distinctes, une en amont des injecteurs, l'autre en aval (figure 9). Ce résultat, conforme aux mesures expérimentales, aurait théoriquement pu être obtenu directement par simulation moyenne (RANS), ce qui n'est malheureusement pas le cas, faute d'une description suffisamment correcte de l'interaction turbulence / combustion par les modèles moyens.

Fig.8 – Simulation aux grandes échelles d'un écoulement type stato-réacteur. Deux jets prémélangés air / propane sont injectés l'un sur la face supérieure, l'autre sur la face inférieure d'une chambre de combustion. Les gaz chauds sortent du brûleur par la face droite. En haut : champ instantané de température, en bas : champ instantané, au même instant, de taux de réaction [9].

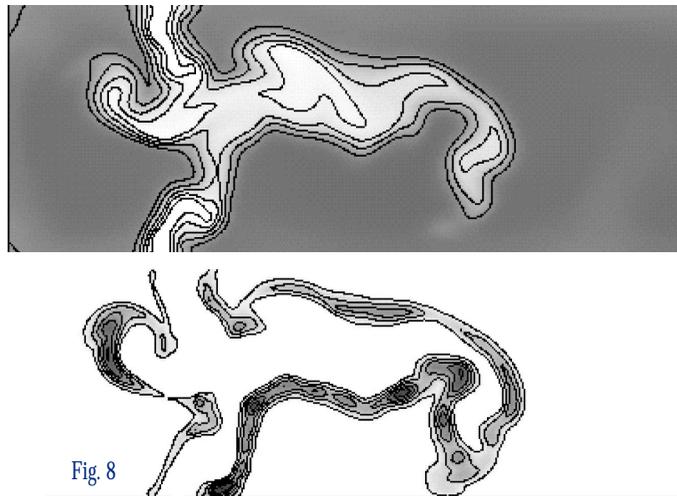


Fig 8

La simulation numérique de la combustion turbulente, destinée à fournir des résultats prédictifs fiables pour le développement de foyers industriels, constitue un challenge ambitieux et difficile. La simulation aux grandes échelles a déjà donné des résultats prometteurs. Malgré des modélisations relativement simples, des phénomènes difficiles à décrire avec des simulations d'écoulements moyens (RANS) ont pu

être reproduits. Bien évidemment, ces résultats, encore préliminaires, doivent être testés et validés plus avant.

D'autres phénomènes plus complexes devront être intégrés : formation des espèces polluantes (et donc schémas cinétiques détaillés, capables de décrire précisément la formation d'espèces minoritaires), écoulements diphasiques (combustible liquide), ...

Fig. 9

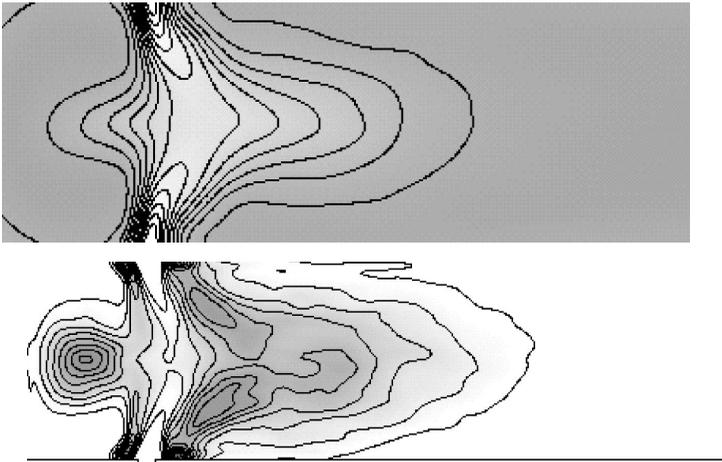


Fig.9 – Simulation aux grandes échelles d'un écoulement type statoréacteur. Moyennes au cours du temps des champs instantanés du type de la figure 8. En haut : champ moyen de température, en bas : champ moyen de taux de réaction [9].

Ce développement doit aussi s'accompagner d'un effort numérique important. En effet, si l'impact de la modélisation est, en principe, réduit en LES, le coût numérique est élevé et peut devenir prohibitif : simulations instationnaires tri-dimensionnelles suffisamment résolues, avec un code suffisamment précis pour ne pas oblitérer les modélisations par la diffusion numérique. Il faut aussi être capable de décrire correctement des conditions initiales et aux limites instationnaires, ... Evidemment, les besoins de calculs vont croître en proportion, que ce soit pour les simulations directes destinées au développement des modèles que pour les simulations aux grandes échelles proprement dites (suivi de plus d'espèces chimiques, domaines de calcul plus grands, maillages plus fins, géométries plus complexes, ...). Le coût d'un calcul n'est en lui-même pas significatif : le développement et la validation de modèles requièrent l'étude de l'influence des différents paramètres. Il est alors, à ressources identiques, plus utile d'effectuer dix « petits » calculs plutôt qu'un seul gros. Brutalement résumée, la simulation aux grandes échelles remplace, en partie, des difficultés de modélisation par des problèmes numériques.

Le challenge est aussi expérimental : les simulations aux grandes échelles ne pourront être validées qu'en regard de mesures précises et soignées, fournissant des champs instantanés résolus des principales grandeurs. Il serait en effet illusoire de se contenter de grandeurs moyennes globales.