

DEA – INPT
Dynamique des Fluides

Modélisation d'une flamme Propane/Air par
un schéma cinétique à une étape.

Ghislain Lartigue

Rapport de stage de DEA

CERFACS
CFD – Combustion

Septembre 2000

Résumé.

La prévision numérique des écoulements est aujourd'hui un enjeu essentiel dans le monde industriel comme dans celui de la recherche. La méthode LES (Large Eddy Simulation) a ouvert de nouvelles voies pour la simulation des écoulements non réactifs, et est maintenant en passe d'être appliquée aux écoulements réactifs. Pour ce genre de calcul il est très important est de réussir à modéliser correctement les phénomènes chimiques ayant lieu au sein de la flamme. Pour cela, il existe essentiellement deux types d'approches : d'une part, les schémas cinétiques complexes, précis mais coûteux en temps de calcul, d'autre part, les schémas cinétiques simplifiés (notamment à une seule étape), d'un coût bien moins élevé mais avec de moins bonnes qualités prédictives.

Ce rapport présente un modèle cinétique à une étape pour une flamme Propane/Air qui puisse être utilisé en LES. Ce modèle permet de retrouver la température de fin de combustion et la vitesse de flamme laminaire sur une large gamme de pressions et de richesses. En outre ce genre de schémas réduits posent certains problèmes lors de leur implémentation dans un code de calcul avec un avancement explicite en temps. Il est donc également proposé une nouvelle méthode numérique (implicite localement) permettant de s'affranchir des problèmes de stabilité liés à la raideur du terme source. Des résultats sur un brûleur axisymétrique laminaire avec les deux schémas numériques sont présentés.

Mots clés :

Schéma cinétique, vitesse de flamme, stabilité numérique, schéma implicite.

Abstract.

Numerical simulations of turbulent flows are more and more developed in both industrial and research context. The LES (Large Eddy Simulation) method enables a new level of description for non reacting flows, and is now being applied to reacting flows. A good model for chemical phenomena happening in the flame is necessary for succeeding in this kind of computations. This can be done by two major ways : the first approach, based on a complex chemistry scheme, is very precise but induces high computational cost, while the second one, based on a reduced (single-step) scheme, is much cheaper with not as good predictive abilities.

This report presents a single step chemistry scheme for a Propane/Air flame which can be used in LES. This model gives a correct final flame temperature and burning velocity on a large range of pressures and equivalence ratios. With this kind of reduced scheme new problems rise when implemented in an explicit time stepping code. A new numerical method that overcomes the stability problem thanks to a locally implicit formulation is proposed. Finally, results on a laminar axisymetrical burner with both numerical schemes are presented.

Keywords :

Chemistry scheme, combustion velocity, numerical stability, implicit scheme.

Table des matières

Résumé / Abstract.	1
Introduction.	3
1 Contexte de l'étude.	4
1.1 Les phénomènes à modéliser.	4
1.2 Les équations associées en monodimensionnel.	6
1.3 Les schémas cinétiques.	7
1.4 Les codes de calcul utilisés.	10
2 Modélisation de schémas cinétiques à une étape.	11
2.1 Comparaison entre les schémas Peters et WD2.	12
2.2 Comparaison entre PREMIX et AVBP.	14
2.3 Etude du schéma WD2.	15
2.4 Influence des coefficients de la loi d'Arrhenius.	17
2.5 Etude du schéma GL.	20
3 Implémentation d'un schéma localement implicite dans AVBP.	22
3.1 Motivations.	22
3.2 Le schéma.	24
3.3 Résultats sur des flammes 1D.	28
4 Validation du schéma numérique sur un brûleur axisymétrique.	31
Conclusion.	34
Bibliographie.	35

Introduction.

La différence fondamentale entre la combustion et la mécanique des fluides “classique” est bien évidemment la dimension liée à la chimie des écoulements réactifs. En effet, une flamme peut être considérée comme le lieu où un combustible et un oxydant réagissent entre eux. Il s’agit d’une réaction chimique au cours de laquelle l’énergie chimique potentielle contenue dans les réactifs est transformée en énergie thermique. Ainsi, de nombreux phénomènes se produisent dans le front de la flamme : disparition des réactifs, apparition des produits, dégagement de chaleur, accélération de l’écoulement, baisse de la densité, diffusion des espèces, de la chaleur ...

Ces phénomènes ont une influence majeure sur l’écoulement et réussir à les modéliser correctement est un enjeu essentiel pour une bonne description de l’écoulement en général. Toutes ces notions sont rappelées dans le premier chapitre.

Le premier objectif de ce stage était de construire un modèle pour la chimie d’une flamme de propane qui puisse être utilisé dans le code AVBP du CERFACS. Il y avait ainsi deux contraintes essentielles à satisfaire pour ce modèle : d’une part le modèle devait reproduire autant que possible les phénomènes se produisant dans la flamme (ou du moins leurs principales conséquences), et d’autre part, il devait être compatible avec les choix techniques qui ont été pris lors de la conception d’AVBP et en particulier avec la contrainte d’intégration temporelle explicite. La description de ce modèle fait l’objet du second chapitre de ce rapport.

Il s’est cependant avéré que ces deux contraintes pouvaient rarement être vérifiées simultanément sur un domaine suffisamment étendu de richesses et de pressions. Ainsi, plutôt que de renoncer à un modèle qui possède par ailleurs de nombreux avantages, il est proposé de modifier la formulation explicite du solveur AVBP afin d’assurer la stabilité vis à vis du terme source chimique. Il a pour cela été choisi une formulation localement implicite qui permet de résoudre ce problème tout en conservant les qualités de précision temporelle et spatiale du schéma actuel (de type Lax-Wendroff/Volume-Finis). Le principe de ce nouveau schéma sera détaillé dans le troisième chapitre.

Enfin, tous ces développements ayant été effectués sur des flammes monodimensionnelles, un premier test sur une configuration réelle sera présenté dans le dernier chapitre. Il s’agit d’un brûleur laminaire qui a été étudié expérimentalement par Le Helley [5] au laboratoire EM2C.

Chapitre 1

Contexte de l'étude.

1.1 Les phénomènes à modéliser.

Le but de cette étude était de construire un modèle pour la chimie de la flamme propane/air. Pour cela, il a fallu mener des expériences numériques qui puissent être comparées à des résultats expérimentaux, permettant ainsi d'affiner le modèle. En outre, il fallait trouver une configuration qui soit la plus simple possible (pour minimiser le temps de calcul), qui mette en valeur le phénomène à étudier (la chimie) et qui ne soit pas dominée par d'autres phénomènes (la turbulence, les interactions flamme-paroi, ...).

La configuration retenue est donc une flamme laminaire 1D parfaitement prémélangée. Cette configuration correspond à une flamme plane se propageant perpendiculairement à son plan au sein d'un milieu composé d'un mélange d'air et de propane, infini dans toutes les directions (cf. figure 1.1). On ne s'est intéressé qu'aux déflagrations (par opposition aux détonations), phénomènes au cours desquels la flamme se propage à une vitesse de l'ordre du mètre par seconde. Cependant, bien que subsonique, l'écoulement n'en est pas moins compressible. En effet, une déflagration est un phénomène quasiment isobare, mais la température peut y varier de plus de 1000 K , et donc la densité peut elle aussi varier très fortement. Des profils caractéristiques de ce genre de flamme sont représentés sur la figure 1.2.

Le mélange gazeux dans lequel se produit la réaction ne peut être considéré comme un fluide parfait puisque la flamme est un phénomène gouverné essentiellement par la chimie liée à la réaction, mais aussi par la diffusion des espèces et de la température. Rappelons finalement que les phénomènes liés à la combustion peuvent se ramener simplement à un terme source sur les espèces (disparition des réactifs, apparition des produits) et un terme source sur l'énergie (transformation de l'enthalpie contenue dans les réactifs en chaleur).

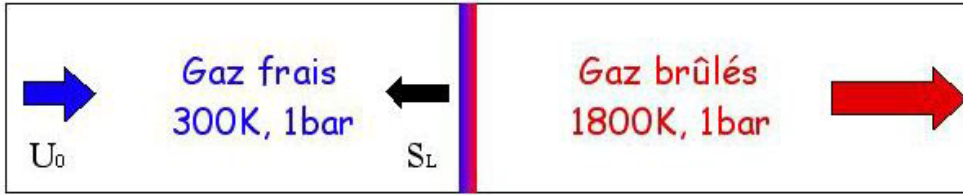


FIG. 1.1 – Description schématique d’une flamme 1D.

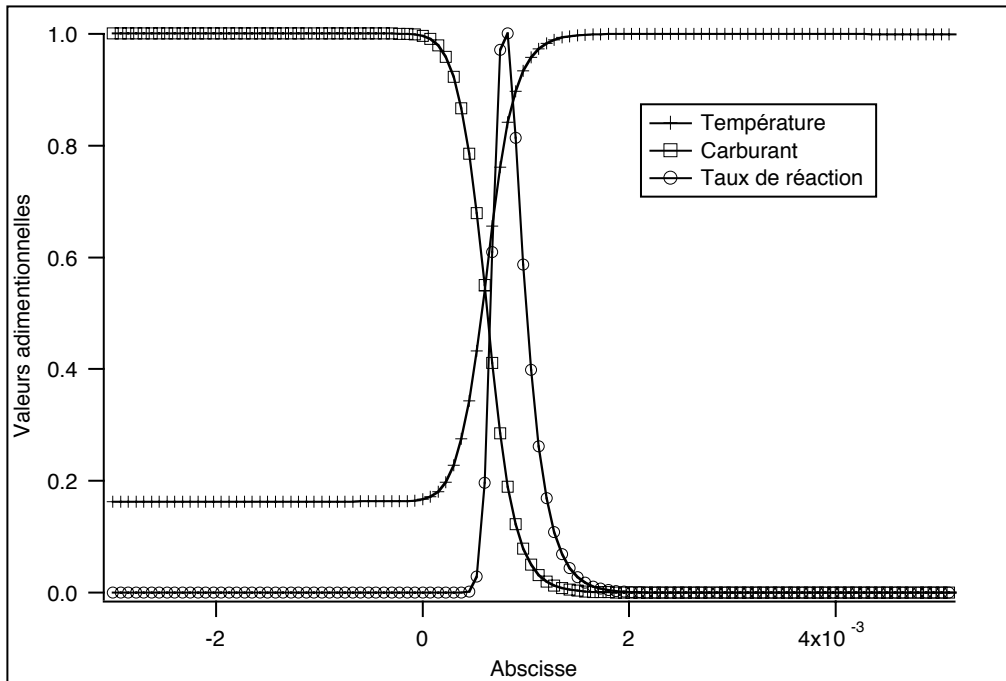


FIG. 1.2 – Profils caractéristiques dans le front de la flamme.

1.2 Les équations associées en monodimensionnel.

1.2.1 Conservation des espèces et de la masse.

L'équation de conservation de l'espèce k s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho(u + V_k)Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (1.1)$$

où Y_k est la fraction massique de l'espèce k , V_k sa vitesse de diffusion et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de cette espèce. La vitesse de diffusion d'une espèce k peut être interprétée comme la vitesse propre cette espèce par rapport au reste du mélange. Cette vitesse est souvent modélisée par la loi de Fick ($V_k Y_k = -D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x}$).

Le taux de réaction d'une espèce est uniquement liée à la réaction chimique se produisant dans l'écoulement et s'exprime en $kg.m^{-3}.s^{-1}$.

Une réaction chimique ne crée pas de masse et donc l'équation de continuité classique reste inchangée :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \quad (1.2)$$

Cette équation se retrouve simplement en faisant la somme de toutes les équations sur les espèces et en tenant compte des relations :

$$\sum_k \dot{\omega}_k = 0$$

et :

$$\sum_k V_k Y_k = 0$$

1.2.2 Conservation de la quantité de mouvement.

Cette équation s'écrit ici de la même manière que pour un écoulement non-réactif :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} = \frac{\partial \sigma}{\partial x} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau}{\partial x} \quad (1.3)$$

avec :

$$\tau = \frac{4}{3}\mu \frac{\partial u}{\partial x}$$

La réaction chimique n'intervient pas directement sur le bilan de quantité de mouvement. L'influence de la flamme sur l'écoulement se fait néanmoins sentir à travers la viscosité qui augmente beaucoup lorsque la température augmente. De même la vitesse augmente comme la température alors que la densité décroît dans le même rapport.

1.2.3 Conservation de l'énergie.

Il existe de nombreuses formes équivalentes pour cette équation.

La forme conservative s'écrit :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u E) = \dot{\omega}_T - \frac{\partial q}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(\sigma u) \quad (1.4)$$

où E représente la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie interne par unité de masse :

$$E = \frac{1}{2}u^2 + \int_{T_0}^T C_v(T)dT \quad (1.5)$$

Le terme source $\dot{\omega}_T$ est issu de la combustion et s'exprime en $J.m^{-3}.s^{-1}$:

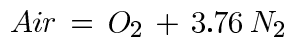
$$\dot{\omega}_T = - \sum_k \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k$$

où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k . Le terme q représente le flux d'énergie et s'exprime par la loi de Fourier (comme en écoulement non-réactif), auquel on doit ajouter un terme de transport de l'enthalpie par les espèces :

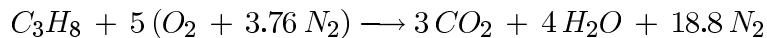
$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_k h_k Y_k V_k \quad (1.6)$$

1.3 Les schémas cinétiques.

Le fuel auquel on s'est intéressé dans cette étude est le propane et l'oxydant utilisé sera toujours de l'air. Par la suite on considèrera l'air comme un gaz dont la composition chimique est donnée par 3.76 moles d'azote pour 1 mole d'oxygène :



Ainsi, la réaction globale du propane avec l'oxygène de l'air s'écrit :

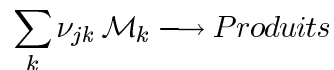


Cette écriture est une convention qui signifie seulement qu'une mole de propane et cinq moles d'oxygène réagissent totalement l'une avec l'autre pour donner différents produits de combustion. Le travail de modélisation consiste donc à trouver un schéma cinétique qui reproduise certaines propriétés de la flamme associée à cette réaction.

Les schémas complexes.

En fait, la réalité est très loin de cette description globale de la réaction. En effet, ce genre de flamme peut produire bien d'autres espèces : du monoxyde de carbone, des oxydes d'azotes (NO_x), des suies, ...

Les réactions de ce type sont en fait des phénomènes d'une très grande complexité : par exemple, le schéma cinétique de Peters pour le propane [7] est composé de 84 réactions et de 31 espèces. Chacune de ces réactions élémentaires représente un mécanisme chimique au niveau moléculaire : une réaction correspond à un choc entre molécules au cours duquel un petit nombre d'atomes est échangé. Ainsi, toutes les espèces présentes peuvent réagir entre elles, certaines violemment, d'autres avec un temps caractéristique plus long, en libérant ou en absorbant plus ou moins d'énergie. Si la réaction j entre différents réactifs \mathcal{M}_k se met sous la forme :



alors le taux d'avancement q_j de cette réaction s'écrit :

$$q_j = K_j \prod_k (X_k)^{\nu_{jk}} \quad (1.7)$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k et où la constante de réaction K_j est modélisée par la loi d'Arrhenius :

$$K_j = A_j T^{\beta_j} e^{-\frac{Ea_j}{RT}} \quad (1.8)$$

Le taux de réaction d'une espèce particulière k s'écrit alors :

$$\dot{\omega}_k = W_k \sum_j \nu_{jk} q_j$$

Williams fourni une explication à ces relations dans [14] : l'expression 1.7 signifie simplement que la probabilité de rencontre entre les molécules impliquées dans un mécanisme est proportionnelle à la concentration de chaque produit. L'équation 1.8 montre que lorsqu'une telle rencontre a lieu, la probabilité que la réaction considérée se produise ne dépend que de la température (à travers les constantes β et Ea) et de "l'affinité" des produits entre eux (modélisée par la constante pré-exponentielle A).

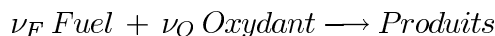
Ainsi, si ce modèle est le seul à être vraiment réaliste, il possède néanmoins deux inconvénients majeurs :

- il faut savoir quelles sont les réactions élémentaires qui constituent le schéma,
- il faut connaître la valeur des coefficients A , β et Ea de chacune de ces réactions.

Les schémas réduits.

Les inconvénients des schémas complexes cités ci-dessus sont souvent très difficiles à surmonter lors de leur implémentation dans un code non dédié à la combustion et il est souvent nécessaire de trouver un autre type d'approche pour pouvoir mener à bien des calculs d'écoulements réactifs dans des configurations réalistes. Les schémas cinétiques à une étape constituent une alternative intéressante aux schémas complexes.

Ces schémas ont pour but de modéliser simplement la combustion en se basant uniquement sur le bilan chimique global. Ainsi, si le bilan des espèces s'écrit :



on modélise le taux d'avancement de la réaction par :

$$q = AT^\beta \left(\frac{\rho Y_F}{W_F} \right)^{n_F} \cdot \left(\frac{\rho Y_O}{W_O} \right)^{n_O} e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (1.9)$$

et l'on a :

$$\begin{cases} \dot{\omega}_F &= \nu_F W_F q \\ \dot{\omega}_O &= \nu_O W_O q \\ \dot{\omega}_T &= Q_{\text{reac}} \dot{\omega}_F \end{cases} \quad (1.10)$$

$$(1.11)$$

$$(1.12)$$

$$(1.13)$$

Dans cette écriture, on ne fait plus intervenir que les réactifs du bilan global. Cela présente un avantage énorme par rapport au schéma complexe précédent, puisque l'on ne fait plus qu'un seul calcul de taux d'avancement lors d'une itération au lieu de plusieurs dizaines. En outre, on travaille sur les fractions massiques de seulement deux réactifs et non plus sur un grand nombre d'espèces intermédiaires, d'où un gain énorme en terme de stockage des données en mémoire.

Il ne faut cependant pas masquer le fait que ces améliorations sur le plan numérique impliquent en contrepartie une perte du contenu physique des phénomènes (dissociations aux températures élevées, comportement en richesse, formation de polluants, extinction, allumage ...). En abandonnant ce niveau de description, il est illusoire de compter retrouver ce genre de phénomènes dans les résultats d'un schéma réduit. Le travail de modélisation consiste donc ici à trouver les coefficients qui permettront de reproduire au mieux les propriétés qui nous intéressent (ici, la température de fin de combustion et la vitesse de flamme), pour une flamme donnée et dans un certain domaine de validité.

1.4 Les codes de calcul utilisés.

1.4.1 Le code PREMIX.

PREMIX [4] est un programme de calcul de réactions en phase gazeuse qui permet de résoudre les équations décrites dans la section 1.2 dans le cas d'une flamme stationnaire. La discrétisation se fait par la méthode des différences finies et le système non-linéaire obtenu est résolu par une méthode de type Newton.

Le point fort de ce code est sa capacité à décrire très finement la réalité physique et chimique des phénomènes. Il peut en effet prendre en compte un nombre très important d'espèces et de réactions, permettant ainsi d'utiliser des schémas très évolués. En outre, les termes de transport moléculaire des équations ainsi que différents coefficients thermodynamiques (notamment la capacité calorifique du mélange) sont modélisés par des fonctions de la température, ce qui améliore leur évaluation. Enfin, la capacité du code à raffiner les maillages permet de résoudre la flamme de manière précise sur un nombre de points relativement faible, d'où un gain important en temps de calcul. Le principal inconvénient de PREMIX est qu'il ne peut faire des calculs que dans la configuration très limitée de flammes 1D stationnaires et donc ne peut en aucun cas être utilisé dans des configurations industrielles.

1.4.2 Le code AVBP.

Le code AVBP [12], développé au CERFACS, permet de résoudre les équations de Navier-Stokes compressibles laminaires et turbulentes. Il a été essentiellement développé dans l'optique de résoudre des champs instationnaires grâce à la méthode LES. Depuis 1996, le développement s'est orienté vers la modélisation d'écoulements turbulents réactifs. A ce jour, c'est un code multi-espèces monophasique, c'est à dire qu'il peut résoudre tout type de flamme (prémélangée, de diffusion) tant que les espèces sont toutes en phase gazeuse (pas de gouttelettes).

Du point de vue numérique, AVBP possède deux principaux schémas de discrétisation :

- un schéma Lax-Wendroff, de type méthode des volumes finis avec une formulation "cell-vertex" (les inconnues sont stockées aux noeuds),
- un schéma Taylor-Galerkin modifié [1], de type éléments finis.

Ce dernier schéma est du troisième ordre en espace et en temps, et a été développé pour les calculs de LES qui nécessitent une très grande précision tant du point de vue dispersif que dissipatif. L'intégration temporelle de tous ces schémas est assurée par un schéma de Runge-Kutta explicite à plusieurs étapes. Finalement les conditions aux limites utilisées sont les conditions NSCBC [9], connues pour leurs excellentes qualités acoustiques.

Chapitre 2

Modélisation de schémas cinétiques à une étape.

On disposait déjà de schémas cinétiques pour le propane : d'une part un schéma complexe proposé par Peters [7], d'autre part d'un schéma à une étape proposé par Westbrook et Dryer [13].

Des calculs avec PREMIX ont permis de comparer ces deux schémas de manière précise et d'en tirer les premières conclusions quant à la pertinence d'un schéma à une étape. La première partie de ce chapitre est consacrée à la présentation de ces résultats et le second à la comparaison entre PREMIX et AVBP sur un même cas de référence.

La troisième partie montre les résultats de flammes obtenues avec AVBP pour le schéma à une étape de Westbrook et Dryer (le schéma WD2). On s'est intéressé au comportement de la flamme dans diverses conditions de pression et de richesse.

La partie suivante présente plus en détail les différents problèmes rencontrés lors de ces simulations, ainsi que leur cause et la façon de les traiter. La dernière partie expose les résultats obtenus avec le schéma que l'on a finalement retenu (le schéma GL).

Le tableau 2.1 rassemble les différentes flammes qui ont été calculées :

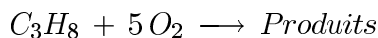
#	Code	Schéma	Q_{reac} <i>J/g</i>	C_p <i>J/kg/K</i>	A [cgs]	n_F	n_O
1	PREMIX	Peters	50100	N/A	N/A	N/A	N/A
2	PREMIX	WD2	47094	N/A	$3.88 \cdot 10^{12}$	0.1	1.65
3	AVBP	WD2	47094	1437.5	$3.88 \cdot 10^{12}$	0.1	1.65
4	AVBP	GL	47094	1437.5	$1.65 \cdot 10^{11}$	0.5	1.0

TAB. 2.1 – Les 4 flammes test.

2.1 Comparaison entre les schémas Peters et WD2.

Le schéma de Peters pour le propane est composé de 84 réactions entre 31 espèces. C'est un schéma complexe bien connu pour fournir des résultats très proches des données expérimentales.

Le schéma de Westbrook et Dryer est un schéma simplifié à une étape basé sur la réaction globale



Les taux de réactions de chaque espèce et de la température sont modélisés par les équations 1.9 et 1.10. Les coefficients correspondant à ce schéma sont rappelés dans le tableau 2.2.

Paramètre	n_F	n_O	β	A [cgs]	Ea cal.mol ⁻¹
Valeur	0.1	1.65	0	$3.88 \cdot 10^{12}$	30000

TAB. 2.2 – Coefficients du schéma WD2.

Les figures 2.1 à 2.2 montrent les résultats obtenus sur les flammes 1 et 2, lors d'un calcul à $P = 1 \text{ bar}$, $T^{in} = 300 \text{ K}$ et $\phi = 1$. On rappelle que le mélange air/propane est considéré comme homogène et que la richesse est définie par :

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} \quad (2.1)$$

où s est le rapport stœchiométrique :

$$s = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} \quad (2.2)$$

Ainsi $\phi = 1$ correspond à une flamme où les réactifs sont en proportion stœchiométrique. Une flamme où $\phi > 1$ est une flamme dite riche, alors que lorsque $\phi < 1$, la flamme est dite pauvre.

Sur la figure 2.1, on peut voir que les taux de réactions sont différents pour les flammes 1 et 2 (ce qui n'est pas surprenant vu la manière dont sont calculées ces deux grandeurs). Le seul résultat comparable est l'intégrale du taux de réaction, qui représente la vitesse de flamme et qui est identique dans les deux simulations.

En effet la vitesse de flamme doit être interprétée comme la vitesse combustion, c'est à dire la vitesse à laquelle se déplace la flamme dans un milieu au repos, et est donnée par :

$$s_L = \frac{-\int_{in}^{out} \dot{\omega}_F}{\rho^{in}(Y_F^{in} - Y_F^{out})} \quad (2.3)$$

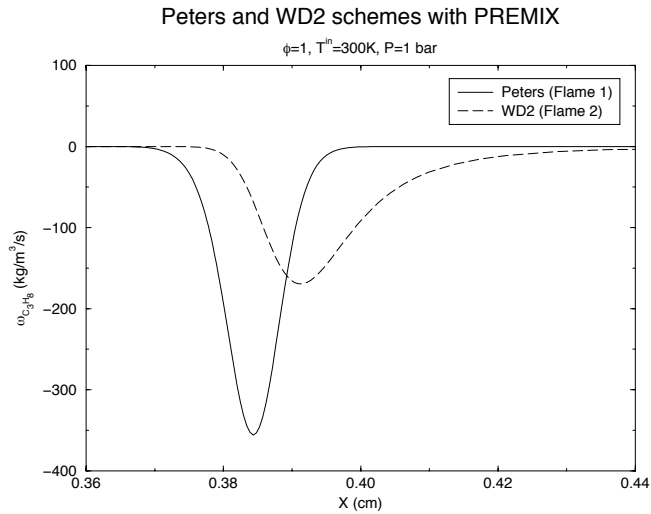


FIG. 2.1 – Taux de réaction du propane pour un schéma complexe et un schéma réduit. Les abscisses sont calées pour que le saut de température ait lieu à la même position.

La figure 2.2 montre que le profil de température est moins raide avec un schéma complexe qu'avec le schéma à une étape, en particulier au niveau de la queue de la flamme. Cela s'explique par les dissociations qui ont lieu aux températures élevées et qui sont très endothermiques. Leurs effets ont été pris en compte dans le schéma WD2 pour que la température de fin de combustion soit la même pour les deux flammes (pour cela, on a multiplié la chaleur de réaction du schéma réduit par un coefficient de dissociation inférieur à 1).

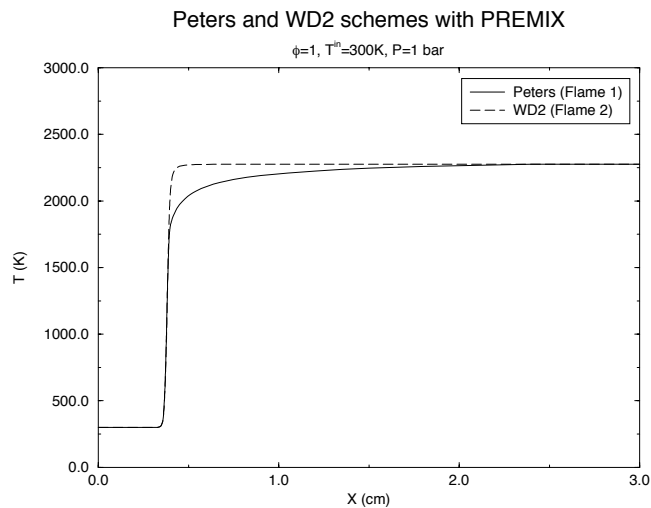


FIG. 2.2 – Température pour un schéma complexe et un schéma réduit.

2.2 Comparaison entre PREMIX et AVBP.

Le second test était de calculer une flamme avec PREMIX et AVBP sur une configuration identique (les flammes 2 et 3) afin de comparer les résultats fournis par les deux codes. Comme précédemment, la flamme test est à $P = 1 \text{ bar}$, $T^{in} = 300 \text{ K}$ et $\phi = 1$.

Un paramètre important à fournir à AVBP est la chaleur de réaction. On souhaite obtenir une température de fin de flamme de 2277 K (qui est la valeur expérimentale et également celle fournie par PREMIX) et la chaleur de réaction doit vérifier :

$$T^{out} = T^{in} + \frac{Q_{reac} \cdot (Y_F^{in} - Y_F^{out})}{C_p} \quad (2.4)$$

En outre on désire garder la valeur de $Q_{reac} = 47100 \text{ J/g}$ utilisée dans PREMIX. Cela signifie que l'on doit prendre $C_p = 1437 \text{ J/kg/K}$ pour les calculs avec AVBP. Cette valeur est bien compatible avec les valeurs fournies par le schéma de Peters sur la flamme 1, où la capacité calorifique du mélange varie de 1000 à 1700 J/kg/K .

La figure 2.3 montre que les taux de réactions sont quasiment identiques. La seule différence notable se situe sur le pic du taux de réaction qui est légèrement plus faible avec AVBP. Ce résultat est sûrement la conséquence d'un maillage trop grossier pour permettre de capter finement le pic.

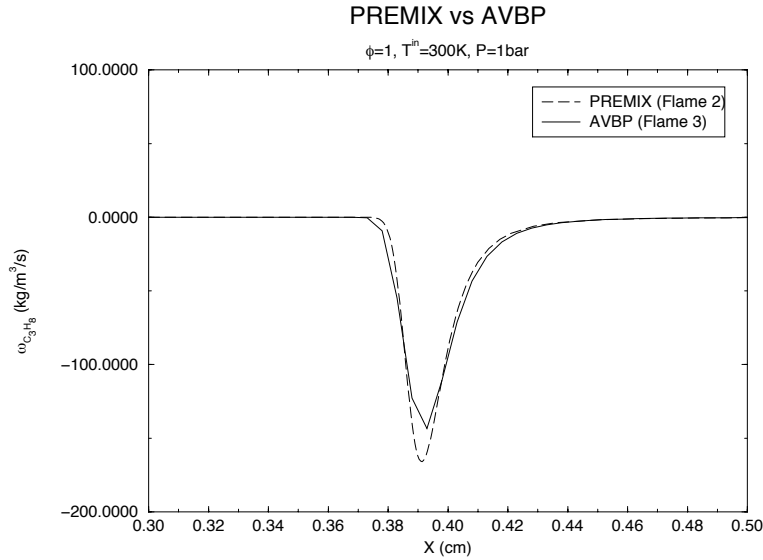


FIG. 2.3 – Comparaison entre PREMIX et AVBP : taux de réaction du fuel.

La figure 2.4 montre également un très bon accord entre PREMIX et AVBP sur les champs de température, ce qui prouve que la chaleur de réaction et la capacité calorifique ont été bien choisies.

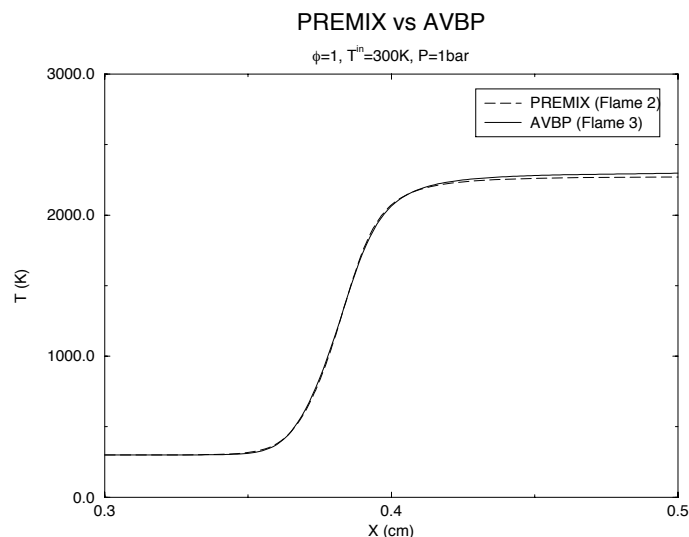


FIG. 2.4 – Comparaison entre PREMIX et AVBP : température.

Pour conclure cette partie, on peut dire que pour l’instant, le schéma WD2 répond à nos attentes puisque d’une part il reproduit assez bien les résultats d’un schéma complexe, et d’autre part, les codes PREMIX et AVBP sont en très bon accord sur un calcul identique avec ce schéma.

2.3 Etude du schéma WD2.

2.3.1 Dépendance en pression de la vitesse de flamme.

Lorsque le taux de réaction s’exprime par la loi d’Arrhenius 1.9, Williams (voir [14]) donne une formule pour la vitesse de flamme en fonction de la pression :

$$s_L^{\text{theo}}(P) = s_L(P_0) \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\frac{n_F + n_O}{2} - 1} \quad (2.5)$$

Avec les valeurs fournies par Westbrook et Dryer ($n_F = 0.1$ et $n_O = 1.65$), on devrait trouver pour la flamme 3 une variation en $(P/P_0)^{-0.125}$.

La figure 2.5 montre les résultats obtenus avec AVBP, comparés à la formule ci-dessus et aux données expérimentales d’Egolfopoulos [2]. AVBP et la formule de Williams donnent des résultats identiques sur ce schéma ce qui tend à confirmer que le code se comporte comme prévu lorsque l’on change la pression. Cependant, il apparaît clairement que les coefficients proposés par Westbrook et Dryer ne donnent pas la bonne loi de comportement en pression. Grâce à une régression en loi de puissance

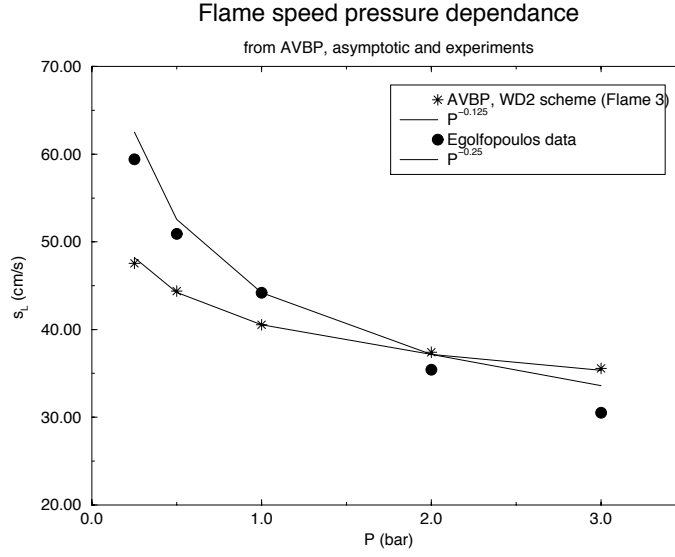


FIG. 2.5 – Dépendance en pression de la vitesse de flamme. Comparaison entre la flamme 3, la formule asymptotique et les points expérimentaux.

sur les points expérimentaux, la meilleure estimation semble être :

$$s_L^{exp}(P) \approx s_L(P_0) \cdot \left(\frac{P}{P_0}\right)^{-0.25} \quad (2.6)$$

En supposant que l'équation 2.5 est valide et qu'elle est correctement reproduite par le code, cela signifie que le schéma devrait vérifier :

$$\mathbf{n_F} + \mathbf{n_O} = 1.5 \quad (2.7)$$

2.3.2 Dépendance en richesse de la vitesse de flamme.

Un autre critère à vérifier pour le schéma est de donner la bonne vitesse de flamme pour différentes valeurs de la richesse du mélange en entrée.

On sait aujourd'hui que la majorité des schémas cinétiques à une étape se comportent correctement en mélange pauvre ($\phi < 1$) mais donnent de mauvais résultats en mélange riche ($\phi > 1$). Ce mauvais comportement se traduit par une erreur systématique sur la vitesse de flamme qui est sur-évaluée pour les flammes riches.

Cela signifie que les mécanismes chimiques impliqués dans une flamme pauvre et riche sont différents et qu'un modèle aussi simple est incapable d'en rendre compte. Or, dans le cas du schéma WD2, même les mélanges pauvres donnent de mauvais résultats car le problème est alors très raide numériquement, comme cela est montré sur la figure 2.6.

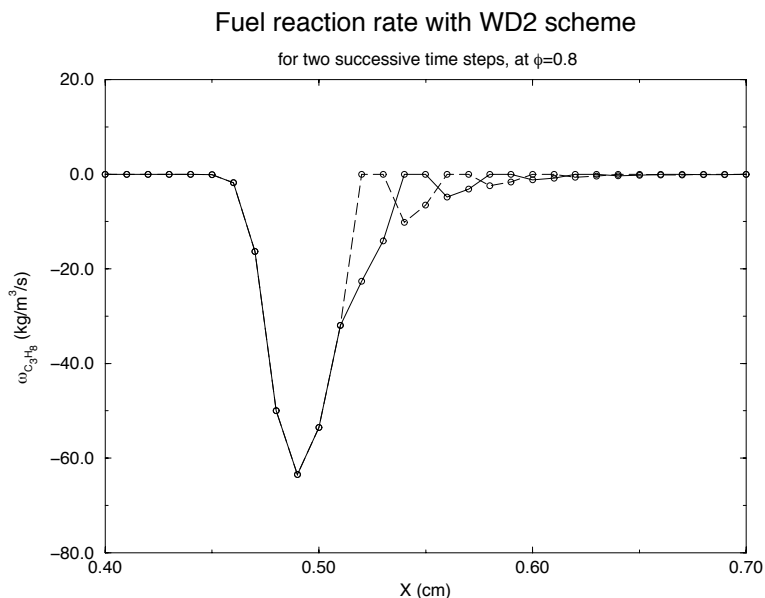


FIG. 2.6 – Oscillations numériques sur le taux de réaction pour un mélange pauvre avec le schéma WD2. On a représenté le taux de réaction pour deux pas de temps successifs. Ces oscillations sont également observables sur la fraction massique de fuel, bien que leur amplitude soit beaucoup plus faible.

La figure 2.6 montre l’allure du taux de réaction calculé avec AVBP pour une flamme brûlant dans un mélange pauvre ($\phi = 0.8$). Des oscillations numériques sont clairement visibles sur le taux de réaction derrière la flamme. En outre, on a également observé une température de fin de combustion trop élevée et une trop grande consommation d’oxydant. Ce phénomène sera plus largement détaillé dans la section suivante.

Il apparaît donc maintenant que le schéma WD2 n’est finalement pas approprié pour modéliser les flammes de propane dans AVBP, à cause de son mauvais comportement par rapport à la pression et par rapport à la richesse.

2.4 Influence des coefficients de la loi d’Arrhenius.

Le but de cette section est de montrer que les coefficients n_F et n_O de la loi d’Arrhenius (équation 1.9) ne peuvent pas prendre n’importe quelles valeurs : certaines conditions doivent être vérifiées quand cette loi est utilisée dans un code de calcul.

2.4.1 Relation entre n_F et n_O .

Un premier résultat est que la vitesse de flamme maximale est obtenue pour une richesse ϕ qui dépend de ces coefficients. En effet, dans les gaz frais on peut écrire :

$$Y_F = \frac{1}{1 + \frac{s}{\phi}K} \quad \text{avec} \quad K = 1 + 3.76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}}$$

et

$$Y_O = \frac{s}{\phi} Y_F$$

En supposant que toutes ces relations sont encore vérifiées dans le front de la flamme, la fonction $Y_F(\phi)^{n_F} \cdot Y_O(\phi)^{n_O}$ est maximum quand :

$$\frac{n_F}{n_O} = \frac{\phi(s_L^{max})}{Ks}$$

Si on néglige l'influence de la température, le taux de réaction (et donc la vitesse de flamme) est proportionnel à $Y_F^{n_F} \cdot Y_O^{n_O}$, et donc il est maximum pour la même valeur de ϕ . Pour le propane, les données d'Egolfopoulos [2] montrent que la vitesse de flamme est maximale pour $\phi = 1.07$. Numériquement, cela signifie que les coefficients n_F et n_O doivent vérifier :

$$\mathbf{n_O \approx 15 n_F} \quad (2.8)$$

2.4.2 Cas où n_F est faible.

Comme il sera montré au chapitre 3, le fait d'avoir un n_F plus petit que 1 implique que l'on commet de très importantes erreurs sur l'estimation du taux de réaction derrière les flammes pauvres : le taux de réaction est alors sur-estimé par rapport à la quantité de réactif réellement présent. Il en résulte que la fraction massique de fuel peut devenir nulle localement. C'est là une explication des oscillations numériques sur le taux de réaction que l'on avait remarqué dans la section précédente (cf. figure 2.6).

2.4.3 Cas où n_O est grand.

Il se pose également un problème quand un coefficient (généralement n_O) est trop grand. Contrairement à ce qui se passait quand un coefficient était trop petit, le taux de réaction est maintenant sous-estimé quand la fraction massique d'oxydant devient petite. Par conséquent, derrière les flammes riches, le taux de réaction calculé est si faible que les réactifs ne sont plus consommés. Il reste donc du fuel mais aussi de l'oxydant en sortie de domaine alors que ce dernier est sensé avoir complètement disparu (on parle d'imbrûlés).

2.4.4 Conclusion sur l'influence de ces coefficients.

Ce qui ressort de cette étude est que les coefficients n_F et n_O de la loi d'Arrhenius doivent vérifier deux conditions pour avoir un comportement physique :

- une condition de dépendance en pression ($n_F + n_O = 1.5$ pour le propane),
- une condition de dépendance en richesse ($n_O \approx 15n_F$ pour le propane).

En outre, deux conditions "numériques" supplémentaires doivent être vérifiées pour que cette loi puisse être implémentée sans problème dans un code explicite :

- n_F n'est pas trop petit (disons supérieur à 0.4) à cause des oscillations numériques,
- n_O n'est pas trop grand (disons inférieur à 2) à cause des imbrûlés.

Dans le cas du propane, les conditions physiques conduisent à $n_F = 0.1$ et $n_O = 1.4$. Cependant, dans ce cas, le coefficient n_F est trop faible et la première condition numérique n'est pas vérifiée. Le schéma final devra donc trouver un compromis entre toutes ces conditions pour fournir des résultats acceptables.

Toutes ces informations sont regroupées sur la figure 2.7.

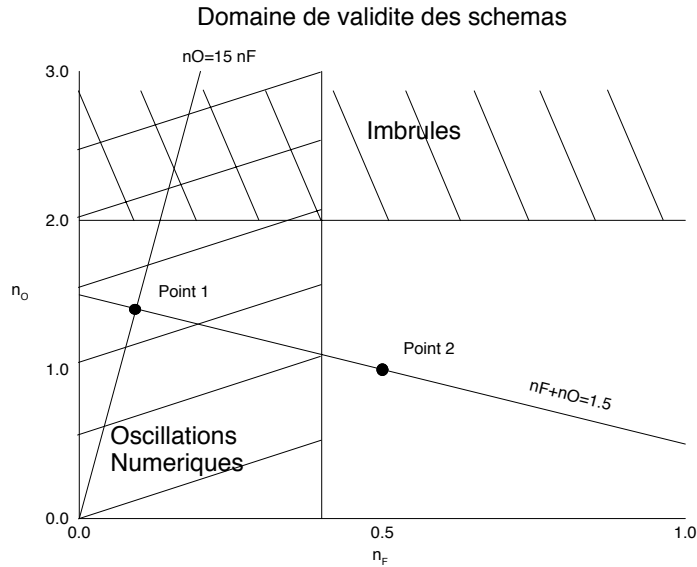


FIG. 2.7 – Domaine de validité des schémas en fonction de n_F et n_O . Le point 1 est le point de fonctionnement physique mais ne satisfait pas les contraintes numériques. Le point 2 correspond au schéma GL décrit dans la section suivante.

2.5 Etude du schéma GL.

Afin de vérifier les conditions de bon comportement numérique, on a décidé d'abandonner la condition physique qui semblait la moins importante dans notre cas. On a donc fait le choix d'imposer une bonne dépendance en richesse pour les mélanges pauvres et de ne pas tenir compte du comportement de la flamme pour les mélanges riches (qui sont de toute façon mal prédits). On a également conservé la condition de dépendance en pression. Finalement on a choisi $n_F = 0.5$ et $n_O = 1.0$.

2.5.1 Dépendance en pression de la vitesse de flamme.

Les résultats sont tracés sur la figure 2.8 : AVBP et la formule asymptotique de Williams (équation 2.5) sont une nouvelle fois très proches. De plus, cette fois ci, l'accord avec les données expérimentales est bien meilleur qu'avec le schéma WD2.

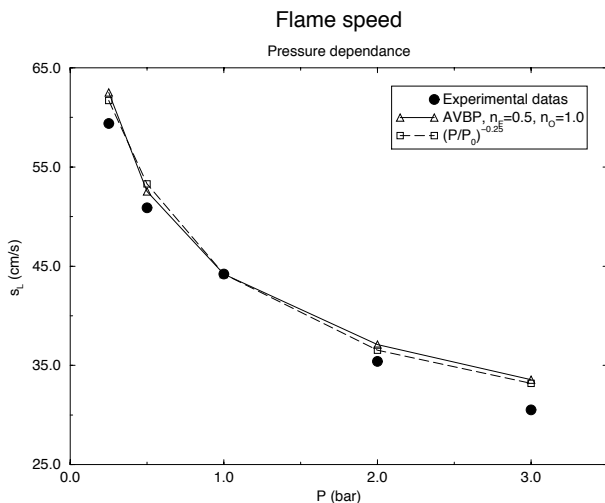


FIG. 2.8 – Vitesse de flamme en fonction de la pression avec le schéma GL.

2.5.2 Dépendance en richesse de la vitesse de flamme.

La figure 2.9 montre que les calculs d'AVBP sont très proches des données expérimentales du côté pauvre, et même jusqu'à $\phi = 1.2$, où l'erreur relative est d'environ 20%. En outre, la condition numérique sur n_F étant mieux vérifiée, on observe pas d'oscillations sur le taux de réaction pour les flammes pauvres. L'hypothèse de comportement asymptotique n'étant pas parfaitement vérifiée à cause de la température d'activation trop faible, la formule asymptotique Williams-Mitani [6] donne de bons résultats du côté pauvre mais manque de précision du côté riche.

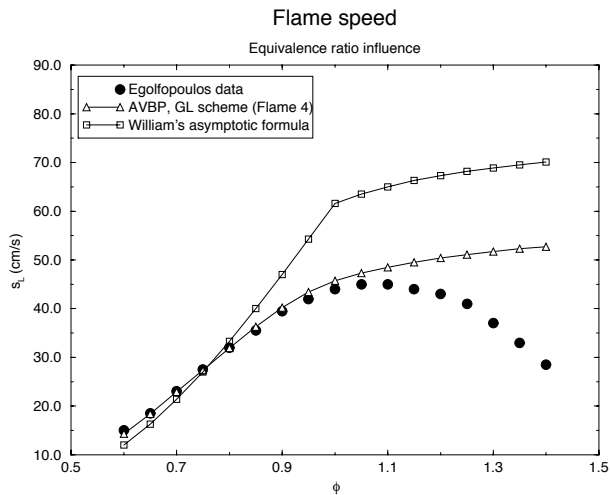


FIG. 2.9 – Vitesse de flamme en fonction de la richesse avec le schéma GL.

2.5.3 Dépendance en richesse de la température de fin de flamme.

La figure 2.10 montre la température de fin de combustion en fonction de la richesse en entrée. On voit que les résultats sont très bons pour des mélanges stoechiométriques et s'écartent des valeurs expérimentales pour les autres richesses. Cela est dû au fait que l'on a calculé un coefficient de dissociation valable pour une température finale élevée (cf. section 2.1). Lorsque cette température diminue, les dissociations qui avaient lieu à $\phi = 1$ ne se produisent plus et donc ce coefficient de dissociation est sous-estimé et la température finale est trop faible.

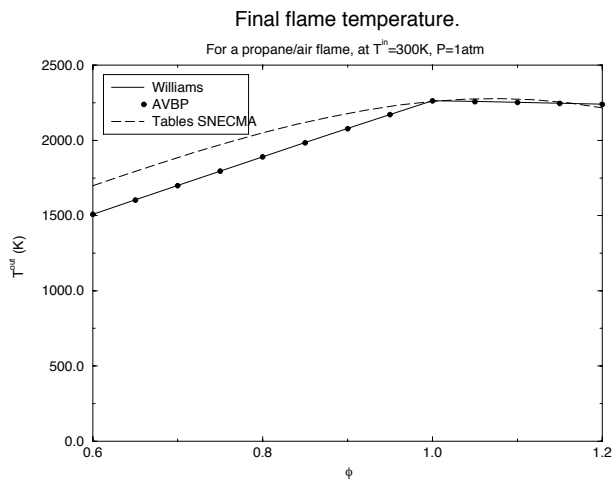


FIG. 2.10 – Température de fin de flamme en fonction de la richesse avec le schéma GL.

Chapitre 3

Implémentation d'un schéma localement implicite dans AVBP.

3.1 Motivations.

On a vu au chapitre précédent que l'utilisation d'un coefficient n_F trop petit pouvait avoir des conséquences désastreuses sur l'évaluation du taux de réaction lorsque celui était calculé de manière explicite. On pourrait penser que cette erreur est due à une instabilité liée à l'utilisation de pas de temps mal adaptés à la chimie. Il était donc tentant d'essayer de trouver un critère de pas de temps "chimique", au même titre qu'il existe un critère CFL pour la convection ou de Fourier pour la diffusion. Cette section a pour but de montrer que si le coefficient n_F est strictement plus petit que 1, un tel critère n'existe pas.

En effet, pour un schéma explicite du premier ordre en temps, les équations de Navier–Stokes peuvent s'écrire sous la forme :

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = -R(w)$$

où le résidu R est la somme de 3 résidus (convection, diffusion et réaction) :

$$R(w) = R_C^n + R_D^n + R_R^n$$

Ainsi, quand la variable considérée est la fraction massique de fuel Y_i au noeud i , l'équation 1.2 devient :

$$Y_i^{n+1} = Y_i^n - \Delta t (R_{i,C}^n + R_{i,D}^n + B_i (Y_i^n)^{n_F}) \quad (3.1)$$

Contrairement aux critères CFL ou de Fourier, la condition que l'on cherche à respecter ici n'est pas la condition classique de stabilité mais une condition dite de

positivité (voire [11] pour une définition précise de toutes ces notions).

Rappelons simplement que le critère classique de stabilité linéaire s'exprime par :

$$-1 < \frac{\delta_i^{n+1}}{\delta_i^n} < 1$$

où δ_i représente une perturbation de la solution stationnaire du système discrétisé. Ce critère signifie que l'amplitude d'une petite perturbation ne va pas être amplifiée au cours des itérations.

Le critère que nous voulons appliquer à notre équation est d'une nature différente puisqu'il ne concerne pas une perturbation appliquée à la solution mais la solution elle-même : cette solution doit rester positive d'une itération à l'autre.

Le choix de ce critère relève de deux considérations évidentes : d'une part une fraction massique est par définition une quantité toujours positive, d'autre part, le calcul du taux de réaction fait intervenir une puissance non-entière de cette fraction massique et ne peut donc être effectué que si elle est positive. Ainsi, contrairement à d'autres grandeurs dont on peut accepter un comportement non physique pendant un bref laps de temps (lors de l'établissement d'un calcul par exemple), la fraction massique ne doit jamais devenir négative. La technique actuelle pour ne pas faire diverger le code lorsque cette quantité devient accidentellement négative est de ramener sa valeur à zéro. C'est cette technique (le "clipping") qui est à l'origine des oscillations numériques que l'on a pu observer sur la figure 2.6 : lorsque localement la fraction massique de fuel devenait négative à cause de la sur-évaluation du taux de réaction, sa valeur était ramenée à zéro et donc à l'itération suivante, le taux de réaction étant nul, redevenait positive grâce aux termes de convections et de diffusion, et ainsi de suite. En outre, on ramenait la fraction massique de fuel à zéro, mais le taux de réaction n'était pas corrigé et donc l'oxydant était surconsommé et l'apport d'énergie sur-évalué.

On peut mener une étude des conditions de monotonie sur l'équation 3.1 en l'écrivant sous la forme :

$$Y^{n+1} = Y^n + \Delta Y_C + \Delta Y_D - B(Y^n)^{n_F} \Delta t$$

d'où :

$$\frac{Y^{n+1}}{Y^n} = 1 + \frac{\Delta Y_C}{Y^n} + \frac{\Delta Y_D}{Y^n} - B(Y^n)^{n_F-1} \Delta t \quad (3.2)$$

Les trois premiers termes du membre de droite de l'équation 3.2 sont bornés alors que le dernier terme ne l'est pas forcément. En particulier, quand $n_F < 1$, le second membre de cette expression est une fonction qui est toujours négative sur un intervalle du type $]0; \varepsilon[$, avec :

$$\varepsilon \approx \left(\frac{B \Delta t}{1 + \frac{\Delta Y_C}{Y^n} + \frac{\Delta Y_D}{Y^n}} \right)^{\frac{1}{1-n_F}} \quad (3.3)$$

Pour un pas de temps fixé, il existe une valeur critique de la fraction massique de fuel en dessous de laquelle le terme source issu de la réaction devient plus grand que

la quantité de fuel présente au point considéré. D'un autre côté, il est possible de rendre ε aussi petit que l'on veut en diminuant le pas de temps, mais on ne peut pas l'annuler, ce qui signifie qu'il n'existe pas de critère temporel assurant la monotonie du schéma.

On peut faire une dernière remarque sur la gravité de la situation quand n_F devient de plus en plus faible. Tout d'abord on peut noter que dans le chapitre précédent, on a utilisé le schéma cinétique GL ($n_F = 0.5$) qui ne présentait pas d'oscillations visibles, alors que le schéma WD2 ($n_F = 0.1$) était complètement inutilisable. Pour un pas de temps fixé, l'expression 3.3 indique que le comportement du terme source devient de moins en moins raide quand n_F tend vers 1, puisque ε tend alors vers 0 et que donc seules les très faibles fractions massiques pourraient poser des problèmes d'oscillations. D'ailleurs, quand $n_F = 1$, le second membre de l'équation devient borné et on peut même écrire un critère temporel qui assure la monotonie du schéma :

$$\Delta t < \frac{1 + \frac{\Delta Y_C}{Y^n} + \frac{\Delta Y_D}{Y^n}}{B}$$

Enfin remarquons que lorsque n_F tend vers 0, le taux de réaction décroît beaucoup moins vite que la fraction massique de fuel. Ainsi toutes les fractions massiques (des plus grandes aux plus faibles) apportent une contribution presque identique à l'intégrale du taux de réaction et donc à la vitesse de flamme. Même si l'on ne commet des erreurs que sur les faibles fractions massiques, ces erreurs sont amplifiées lors du calcul du taux de réaction : c'est ce phénomène qui rend les calculs inutilisables.

Une alternative intéressante à cette situation a été de développer un schéma qui garantisse la positivité des fractions massiques en tout point tout en conservant les propriétés de précision du schéma actuel (Lax-Wendroff/Volumes Finis, second ordre en temps et en espace). On espère ainsi pouvoir utiliser des schémas cinétiques à faible n_F ce qui permettrait de satisfaire les deux conditions de bon comportement physique énoncées dans la section 2.4.4 sans se soucier des conditions numériques.

3.2 Le schéma.

3.2.1 La formulation.

Il s'agit d'un schéma implicite localement, portant uniquement sur le terme source chimique des équations de conservation des espèces et de l'énergie. L'intérêt de ce schéma est double : d'une part il assure la positivité des fractions massiques (à conditions que les critères CFL et Fourier soient respectés), d'autre part la formulation implicite étant locale, il n'y a pas de système matriciel de la taille du maillage à inverser, d'où un faible surcoût en temps de calcul.

Ce schéma est basé sur la formulation suivante :

$$\frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = - \left(R_C^n + R_D^n + R_R^{n+1} \right) \quad (3.4)$$

La seule différence par rapport à l'équation 3.1 est que le terme source est évalué à l'instant $n + 1$ et non plus à l'instant n . Ce schéma n'est donc plus totalement explicite puisque pour trouver la valeur de l'inconnue w à l'instant $n + 1$, il faut résoudre une équation à l'instant n . L'avantage de cette formulation est que le terme source chimique R_R^{n+1} au noeud i n'est fonction que de w_i et non pas de ses voisins. Ici, il suffit de résoudre en chaque point un système de trois équations à trois inconnues comme cela est expliqué plus bas.

En effet pour garantir un bon comportement numérique, il ne suffit pas uniquement d'impliciter le terme source portant sur le fuel mais sur toutes les grandeurs qui subissent l'influence d'un terme source, à savoir le fuel, l'oxydant et l'énergie. Ce système s'écrit en tout point :

$$\begin{cases} x_F + s_F (x_F)^{n_F} (x_O)^{n_O} e^{-\frac{t1}{x_E - t2}} - \widetilde{x}_F = 0 \\ x_O + s_O (x_F)^{n_F} (x_O)^{n_O} e^{-\frac{t1}{x_E - t2}} - \widetilde{x}_O = 0 \\ x_E + s_E (x_F)^{n_F} (x_O)^{n_O} e^{-\frac{t1}{x_E - t2}} - \widetilde{x}_E = 0 \end{cases} \quad (3.5)$$

avec :

$$\begin{aligned} x_F &= (\rho Y_F)^{n+1} & \widetilde{x}_F &= (\rho Y_F)^n + R_{F,C}^n + R_{F,D}^n \\ x_O &= (\rho Y_O)^{n+1} & \widetilde{x}_O &= (\rho Y_O)^n + R_{O,C}^n + R_{O,D}^n \\ x_E &= (\rho E)^{n+1} & \widetilde{x}_E &= (\rho E)^n + R_{E,C}^n + R_{E,D}^n \end{aligned}$$

et, grâce à l'équation 1.5 :

$$t1 = T_a \rho C_v \quad \text{et} \quad t2 = \frac{1}{2} \rho V^2$$

Les x_i représentent les inconnues du système (les variables à l'instant $n + 1$) alors que les \widetilde{x}_i représentent les données du problèmes (les variables à l'instant n , auxquelles on a déjà ajouté les résidus de diffusion et de convection).

Les coefficients s_F , s_O et s_E permettent de prendre en compte les rapports stœchiométriques :

$$s_F = A \cdot \frac{1}{W_F^{n_F}} \cdot \frac{1}{W_O^{n_O}} \cdot \Delta t \quad s_O = \frac{\nu_F W_F}{\nu_O W_O} s_F \quad s_E = -Q_{reac} s_F$$

La résolution de ce système fournit toujours une solution qui vérifie :

$$\begin{cases} 0 < x_F < \widetilde{x}_F \\ 0 < x_O < \widetilde{x}_O \end{cases}$$

On est donc désormais assuré de la monotonie du schéma, mais il faut à présent résoudre ce système.

3.2.2 La résolution du système.

Une méthode efficace sur ce genre de problème non linéaire est l'algorithme de Newton–Raphson multidimensionnel [10]. Il s'agit d'une généralisation de l'algorithme itératif classique de Newton pour une fonction d'une seule variable. Le problème est que la convergence de ce genre d'algorithme dépend très fortement de la solution initiale à partir de laquelle on effectue les itérations. Tout le problème est de trouver une solution initiale la plus proche possible de la solution exacte afin de diminuer le nombre d'itérations nécessaires mais surtout d'assurer la convergence de la méthode itérative.

Pour trouver cette solution initiale, on effectue plusieurs démarches :

- on suppose que l'énergie totale varie peu et on se ramène à un système à deux équations sur x_F et x_O ,
- on cherche laquelle de ces deux variables risque de poser un éventuel problème et l'on écrit une unique équation sur cette variable.

Après la première hypothèse le système 3.5 devient :

$$\begin{cases} x_F + \sigma_F (x_F)^{n_F} (x_O)^{n_O} = \widetilde{x}_F \\ x_O + \sigma_O (x_F)^{n_F} (x_O)^{n_O} = \widetilde{x}_O \end{cases} \quad (3.6)$$

Par combinaison linéaire de ces deux équations on peut écrire que :

$$\sigma_F \cdot x_O - \sigma_O \cdot x_F = \sigma_F \cdot \widetilde{x}_O - \sigma_O \cdot \widetilde{x}_F \quad (3.7)$$

Cette relation est très intéressante car le second membre est positif si le mélange est pauvre, négatif si le mélange est riche et nul pour un mélange stœchiométrique. On peut ainsi déterminer facilement quelle variable est en défaut et risque de poser problème.

Dans le premier cas (mélange pauvre), on a $\sigma_F \widetilde{x}_O > \sigma_O \widetilde{x}_F$, ce qui signifie également $\sigma_F x_O > \sigma_O x_F$.

On fait donc l'hypothèse $\sigma_F x_O \gg \sigma_O x_F$ et on écrit alors que $\sigma_F x_O = \sigma_F \widetilde{x}_O - \sigma_O \widetilde{x}_F$.

Dans le cas riche, un raisonnement analogue conduit à $\sigma_O x_F = \sigma_O \widetilde{x}_F - \sigma_F \widetilde{x}_O$.

Finalement, quand le mélange est stœchiométrique, on a $\sigma_F x_O = \sigma_O x_F$.

Dans tous les cas on peut désormais par substitution ramener le système 3.6 à une seule équation du type :

$$x + \alpha x^c - \widetilde{x} = 0 \quad (3.8)$$

Cette équation fait apparaître trois termes :

- \widetilde{x} qui est la variable “avant la chimie”,
- x qui est la variable “après la chimie”,
- αx^c qui est le terme source.

Pour trouver une solution approchée de cette équation, on cherche quel est le terme dominant entre x et αx^c . Pour cela on compare \tilde{x} à $\alpha \tilde{x}^c$. Si $\tilde{x} > \alpha \tilde{x}^c$, ce sont les termes de transport qui dominent et l'approximation $x^0 = \tilde{x}$ est une bonne solution initiale. Dans l'autre cas, c'est la chimie qui domine et on choisit $x^0 = \left(\frac{\tilde{x}}{\alpha}\right)^{1/c}$ comme solution initiale. L'autre variable est alors calculée grâce à l'équation 3.7.

On dispose donc maintenant de trois solutions initiales x_F^0 , x_O^0 et $x_E^0 = \tilde{x}_E$, et on peut alors appliquer le processus itératif de Newton–Raphson. On rappelle que dans le cas d'une fonction à une seule variable, cette méthode permet de résoudre à partir d'une solution initiale x^0 l'équation $f(x) = 0$ grâce à l'algorithme :

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)} \quad (3.9)$$

Cette méthode s'étend sans difficultés au cas où l'on a un système $F_i(x_1, \dots, x_N) = 0$ avec $1 \leq i \leq N$. Pour cela, on construit la matrice jacobienne du système 3.5, définie par :

$$A_{ij}^k = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right)^k = \begin{pmatrix} 1 + s_F n_F \frac{\omega^k}{x_F} & s_F n_O \frac{\omega^k}{x_O} & s_F \frac{t_1 \omega^k}{(x_E - t_2)^2} \\ s_O n_F \frac{\omega^k}{x_F} & 1 + s_O n_O \frac{\omega^k}{x_O} & s_O \frac{t_1 \omega^k}{(x_E - t_2)^2} \\ s_E n_F \frac{\omega^k}{x_F} & s_E n_O \frac{\omega^k}{x_O} & 1 + s_E \frac{t_1 \omega^k}{(x_E - t_2)^2} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

avec

$$\omega^k = (x_F^k)^{n_F} (x_O^k)^{n_O} e^{-\frac{t_1}{x_E^k - t_2}}$$

L'algorithme devient alors :

$$X^{k+1} = X^k - (A^k)^{-1} \cdot F(X^k)$$

On considère que l'algorithme a convergé lorsqu'un critère d'arrêt est atteint :

$$\max_{i=F,O,E} \left(\frac{x_i^{n+1} - x_i^n}{x_i^n} \right) = \varepsilon \quad \text{avec} \quad \varepsilon = 10^{-12}$$

Comme il a déjà été mentionné plus haut, le seul vrai problème dans notre cas est que l'algorithme peut diverger après quelques itérations. Si la solution initiale est surestimée, l'itéré suivant risque d'être négatif, ce qui signifie la fin de l'algorithme (la fonction F n'est définie que sur les nombres positifs). En revanche, si X^0 est trop sous estimé, l'algorithme peut être très lent à converger. Il est donc impératif de trouver la meilleure estimation possible de la solution afin d'assurer la convergence et cela avec un nombre d'itérations minimal. En effet, il n'a pas été démontré que la solution initiale fournie par cette méthode assure la convergence de l'algorithme, mais à ce jour, aucun cas divergent n'a été rencontré.

3.3 Résultats sur des flammes 1D.

3.3.1 Le schéma WD2 sur une flamme pauvre

C'est sur cette flamme (cf. figure 2.6) que l'on avait constaté l'apparition d'oscillations numériques et que l'on avait conclu que le schéma cinétique WD2 était inutilisable dans notre cas. On a donc refait le même calcul avec le schéma implicite. Une comparaison des résultats obtenus est présentée sur les figures 3.1 et 3.2.

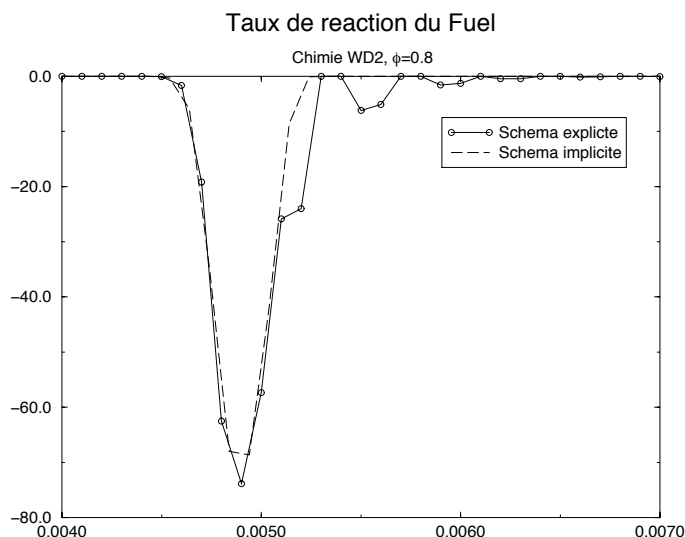


FIG. 3.1 – Taux de réaction du propane avec les schémas explicite et implicite avec la chimie WD2.

La figure 3.1 représente le taux de réaction du propane obtenu avec les deux schémas numériques. On observe évidemment les mêmes oscillations numériques qu'à la figure 2.6 pour le schéma explicite. Par contre on voit très clairement que ces oscillations ont complètement disparu lorsque l'on utilise le schéma implicite.

Sur la figure 3.2, on constate également une nette amélioration du schéma implicite par rapport au schéma explicite sur la prévision du champ de température. En effet, comme on l'avait déjà signalé, la température fournie par le schéma explicite est très surévaluée par rapport à la température théorique à cause d'une post-combustion numérique due aux oscillations du taux de réaction. On constate que l'emploi du schéma implicite permet de retrouver la bonne température de fin de combustion.

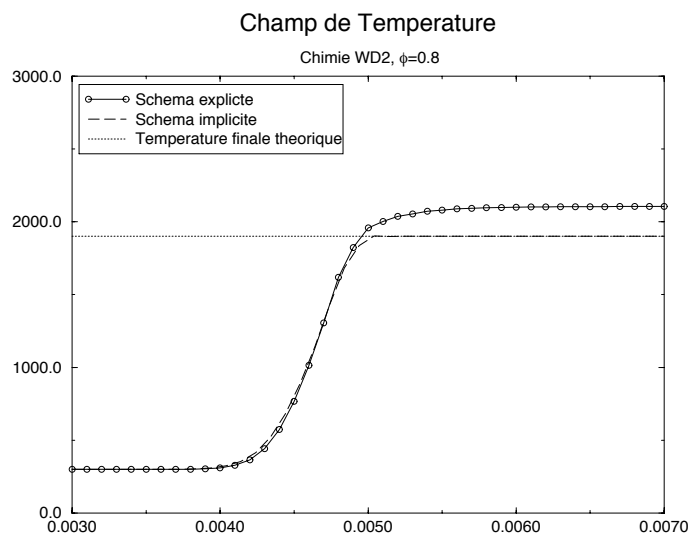


FIG. 3.2 – Champ de température avec les schémas explicite et implicite sur une chimie raide.

3.3.2 Performance de l’algorithme.

Première analyse.

Les tests effectués sur les flammes 1D laminaires ont montré que le surcoût en temps de calcul occasionné par l’emploi d’un schéma implicite était assez variable. En effet, la part la plus importante de cet accroissement du temps CPU est due au fait que l’on fait appel à l’algorithme de Newton–Raphson pour résoudre le système décrit précédemment. Or, suivant l’endroit de la flamme où l’on se place, la convergence est plus ou moins rapide, en fonction de la qualité de la solution initiale fournie à l’algorithme. Ainsi, dans les gaz frais et dans les gaz brûlés, la convergence est rapide car soit la chimie soit le transport domine largement l’autre mécanisme et on arrive toujours à trouver une bonne approximation de la solution. Par contre, dans le front de flamme, les mécanismes de réaction et de transport sont du même ordre de grandeur et l’approximation faite sur la solution initiale est nettement moins bonne : la convergence est plus longue.

On voit donc que l’on peut difficilement dire ce que coûte réellement le nouveau schéma puisque le temps de calcul dépend très fortement de la configuration de l’écoulement. Globalement, on peut s’attendre à une augmentation du temps de calcul qui varie entre 30% et 100%.

Amélioration du schéma.

On voit bien que tout le problème de cette augmentation de temps de calcul vient du fait que l'on utilise l'algorithme de Newton–Raphson dans des situations où cela n'est pas vraiment nécessaire. En fait, on peut même dire que le schéma implicite est généralement inutile dans 90% de l'écoulement.

Pour mieux s'en rendre compte, une idée consiste à linéariser le système 3.5 autour de \tilde{X} :

$$F(\tilde{X}) + \frac{\partial F(\tilde{X})}{\partial X}(X - \tilde{X}) = 0$$

Ce système linéarisé a pour solution :

$$X_I = \tilde{X} - A^{-1}.F(\tilde{X})$$

où A est la jacobienne du système, définie à l'équation 3.10.

En explicite, on aurait trouvé :

$$X_E = \tilde{X} - F(\tilde{X})$$

d'où :

$$X_E - X_I = (A^{-1} - I)F(\tilde{X})$$

Il apparaît ainsi que lorsque $A^{-1} \approx I$, c'est à dire dans notre cas $\det(A) \approx 1$, la solution explicite est une bonne approximation du problème implicite.

Ainsi, sur ce simple critère, on peut décider de traiter le problème selon la formulation la mieux adaptée. Quand $J_A \ll 1$ (c'est à dire quand le terme source est faible, ce qui est le cas pour la plus grande partie de l'écoulement), on utilise la formulation explicite, ce qui présente un gain de temps appréciable tout en fournissant une solution précise. Par contre, dès que cette condition n'est plus vérifiée, on est dans une zone "à risque" (près d'une flamme pauvre) et donc on utilise la formulation implicite qui nous garantit la positivité de la solution.

C'est cette technique qui a finalement été retenue pour être implémentée dans le code AVBP. On est désormais assuré d'avoir une solution stable par rapport à la chimie (on a plus à se soucier d'un éventuel critère de pas de temps chimique) et ce pour un surcoût total qui est maintenant de l'ordre à 10%.

Chapitre 4

Validation du schéma numérique sur un brûleur axisymétrique.

Le test suivant consistait à valider le schéma sur un cas bidimensionnel. La configuration retenue est celle décrite par LeHelley [5] puis plus récemment par Kaufmann [3] : il s’agit d’un brûleur laminaire axisymétrique. Le maillage contient environ 30000 cellules dont une seule dans la direction Θ comme indiqué sur la figure 4.1. En effet, on a utilisé le fait que l’écoulement est axisymétrique pour effectuer les calculs sur une simple “tranche” de la configuration totale. On réduit ainsi la charge de calcul de manière appréciable tout en conservant l’essentiel de la physique de l’écoulement.

La configuration du brûleur consiste en :

- un premier cylindre qui constitue l’entrée des gaz frais prémélangés,
- un élargissement brusque,
- un second cylindre, plus large, qui sert de chambre de combustion ainsi qu’à l’évacuation des gaz brûlés.

L’écoulement est laminaire (le nombre de Reynolds dans les gaz frais est de l’ordre de 100) et on observe donc dans ce brûleur une flamme identique à celle d’un bec Bunsen. On a effectué une simulation avec la chimie WD2 pour le propane avec un mélange en entrée ayant une richesse de $\phi = 0.7$.

On a représenté sur la figure 4.2 le taux de réaction pour les deux schémas utilisés et le résultat est éloquent. Avec le schéma implicite, la flamme est très bien résolue et on observe un taux de réaction parfaitement localisé. Par contre avec le schéma explicite, on observe une post combustion derrière la flamme sous forme de protubérances se détachant de la flamme principale. Il s’agit de l’équivalent bidimensionnel des oscillations numériques déjà observées sur les flammes 1D.

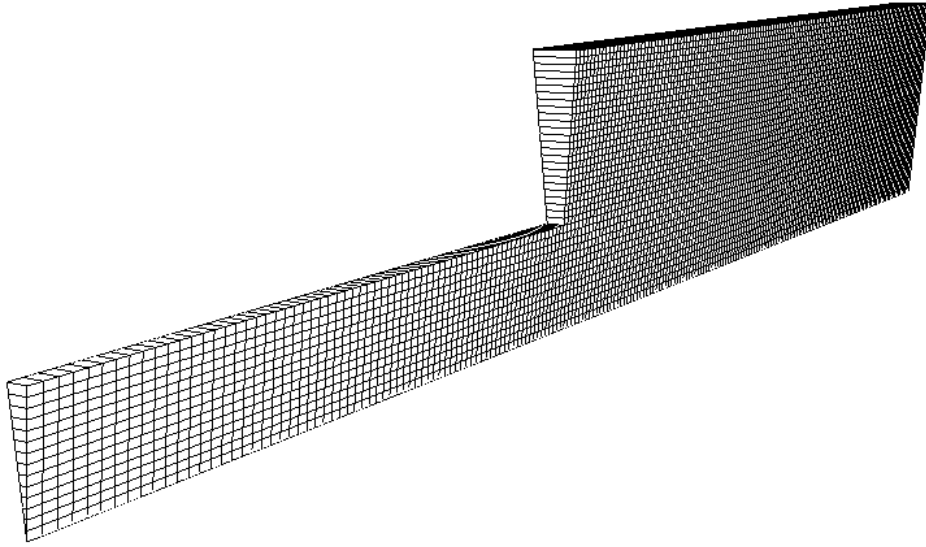


FIG. 4.1 – Géométrie du maillage. Il s'agit d'une tranche de 10 degrés composée d'une seule cellule dans la direction Θ . L'entrée des gaz frais est à gauche et les gaz brûlés sortent par la droite.

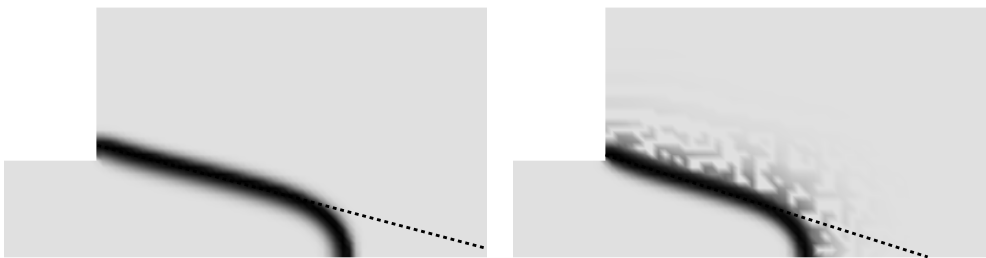


FIG. 4.2 – Taux de réaction du fuel obtenu avec (à gauche) le schéma implicite et (à droite) le schéma explicite. On a également représenté en pointillé l'angle que fait la flamme avec l'axe de la chambre.

On retrouve également le fait qu'en explicite la température en sortie de chambre est supérieure à la température théorique alors que la formulation implicite donne la bonne valeur. La surconsommation d'oxydant observée en explicite est également corrigée grâce au schéma implicite.

Une des grandeurs caractéristique de ce genre d'écoulement est l'angle α que fait la flamme avec l'axe de la chambre. En écrivant que la flamme se positionne à l'endroit où la vitesse normale à celle ci est égale à la vitesse de flamme laminaire s_L , un simple calcul de trigonométrie nous indique que :

$$\sin(\alpha) = \frac{s_L}{U_{moyen}} \quad (4.1)$$

où s_L est la vitesse de flamme laminaire dans les mêmes conditions de richesse, pression et température, et U_{moyen} la vitesse moyenne de l'écoulement dans la section d'entrée.

Avec les valeurs $s_L = 0.35m/s$ et $U_{moyen} = 1.5m/s$, on trouve que le demi-angle au sommet du cône doit valoir $\alpha = 13.5^\circ$.

On constate sur la flamme calculée en implicite que cet angle vaut approximativement $\alpha_I = 14^\circ$ ce qui est très proche de la valeur théorique.

Par contre, sur la flamme calculée en explicite, le demi-angle au sommet du cône vaut $\alpha_E = 18^\circ$. On voit donc que l'on est assez loin de la valeur attendue. La vitesse de flamme est surestimée à cause de la post combustion observée derrière la flamme.

Finalement, on peut conclure que le cas bidimensionnel axisymétrique que l'on vient de traiter met en évidence la nécessité de disposer d'un schéma adapté pour traiter les chimies "raides". En outre, ce cas a permis de valider le schéma implicite sur des écoulements réalistes et non plus uniquement sur des flammes 1D.

Conclusion.

Ce travail, outre l'apport d'une chimie réduite pour la flamme Propane/Air, a également permis de définir une méthodologie pour la conception d'un schéma cinétique réduit quelconque. Ainsi la création d'un nouveau schéma pourra être effectuée de manière beaucoup plus rapide et efficace, grâce à une connaissance préalable des difficultés qui peuvent se présenter et de leurs solutions.

Mon second apport a été de développer une nouvelle méthode numérique, robuste et rapide, dédiée aux schémas cinétiques réduits et de l'implémenter dans le code AVBP, qui est le principal outil de calcul du CERFACS. Cette méthode a fait ses preuves sur des configurations laminares, mono et bidimensionnelles. Les configurations 3D ne semblent pas devoir poser de problèmes particuliers et le prochain effort consiste à valider ce schéma sur des configurations turbulentes (avec un modèle de type LES) ainsi que sur des schémas différents (notamment le schéma TTGC de type éléments finis également utilisé dans AVBP).

Finalement, ce stage m'a permis de prendre un contact un peu plus direct avec les enjeux de la combustion numérique, qui semble devoir occuper une place de plus en plus importante dans les années à venir au niveau de la prédiction des écoulements réactifs. Cet aspect était particulièrement important pour moi, puisque dès le mois d'octobre, je compte effectuer une thèse au CERFACS sur la simulation numérique des instabilités de combustion dans les turbines à gaz, pour la société TURBOMECA/SNECMA.

Bibliographie

- [1] O. Colin. Development of high-order Taylor–Galerkin schemes for les. *Journal of Computational Physics*, 162 :338–371, 2000.
- [2] F.N Egolfopoulos, D.L. Zhu, and C.K. Law. Experimental and numerical determination of laminar flame speeds. In *23th Symposium (International) on Combustion*, pages 471–478. The Combustion Institute, 1990.
- [3] A. Kaufmann. Etude analytique et numérique des instabilités thermoacoustiques : Application au tube de Rijke. Technical report, CERFACS/INPT, 2000.
- [4] R.J. Kee, F.M. Rupley, and J.A. Miller. *CHEMKIN-II : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phas chemical kinetics*. Sandia National Laboratories, Livermore, CA 94551, 1991.
- [5] P. Le Helley. *Etude théorique et expérimentale des instabilités de combustion et de leur contrôle dans un brûleur laminaire prémélangé*. PhD thesis, EM2C, UPR 288, CNRS et Ecole Centrale Paris, 1994.
- [6] T. Mitani. Propagation velocities of two-reactant flames. *Combustion Science and Technology*, 21 :175–177, 1980.
- [7] Peters and Rogg. *Reduced Kinetics Mechanisms for Applications in Combustion Systems*. Springer-Verlag, 1992.
- [8] T. Poinsot and D. Veynante. Cours ENSEEIHT de combustion numérique, 1999-2000.
- [9] T.J. Poinsot and S.K. Lele. Boundary conditions for direct simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101 :104–129, 1992.
- [10] Press, Flannery, Teukolsky, and Vetterling. *Numerical Recipes*. University of Cambridge, fortran edition, 1989.
- [11] P.J. Roache. *Computational Fluid Dynamics*. Hermosa, Albuquerque, revised edition, 1985.
- [12] T. Schönfeld and M. Rudgyard. *The AVBP Handbook V4.3*. CERFACS, 1999.
- [13] C.L. Westbrook and F.L. Dryer. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combustion Science and Technology*, 27 :31–43, 1981.
- [14] F.A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, second edition, 1985.