

Mélange en milieux réactifs

Compte-rendu rédigé par Arnaud Mura

Le premier exposé (Arnaud Mura, Pprime Poitiers) est consacré à l'analyse détaillée de l'influence de réactions chimiques sur l'efficacité du mélange scalaire dans les flammes turbulentes (plutôt prémélangées ou partiellement prémélangées).

Une fois présentées quelques caractéristiques essentielles des structures de flamme laminares, les liens étroits existant entre taux de mélange moléculaire et taux de production chimique sont clairement mis en évidence.

On s'intéresse ensuite à l'évolution (transport) du taux de dissipation scalaire instantané $N_c = D(\partial c / \partial x_i)(\partial c / \partial x_i)$ puis à sa valeur moyenne (ou filtrée) dans un cas non réactif (et à masse volumique constante) de référence. Cette quantité, définie positive du point de vue mathématique, inverse d'un temps (caractéristique) du point de vue dimensionnel, n'est rien d'autre qu'une mesure locale de l'efficacité du mélange scalaire à l'échelle moléculaire. Les termes sources (puits) correspondants sont discutés, et l'importance que revêt l'orientation gradient scalaire / gradients de vitesse locaux soulignée. Des analyses d'ordre de grandeur classiques sont produites pour ce cas de figure, elles permettent de mettre en évidence les contributions essentielles (étirement / courbure).

Le cas d'une réaction chimique froide (sans expansion thermique notable) est ensuite considéré. Les modifications induites sur le transport de la dissipation scalaire sont analysées en détail dans le cas limite où les réactions chimiques sont très rapides (pour des valeurs élevées du nombre de Damköhler Da). La situation associée à des réactions chimiques plus lentes est elle aussi évoquée. Cette analyse permet ensuite d'introduire des représentations algébriques générales qui permettent de décrire ces deux situations. Les représentations de ce type, introduites initialement dans Robin et al. (Combust. Sci. Technol. 2006) et Mura et al. (Combust. Flame 2007) sont aujourd'hui largement employées pour conduire des simulations numériques aussi bien RANS, URANS que LES. Les résultats obtenues avec ce type de fermetures sont illustrés par différents calculs numériques de dispositifs expérimentaux bien documentés, tels que les flammes en V turbulentes étudiées par B. Renou au Coria (voir par exemple Robin et al. Combust Flame 2008).

On s'intéresse ensuite au cas d'une réaction chimique avec expansion thermique. Son influence, en relation avec le maintien de structure de flammes minces (Da élevé), est clairement mis en évidence : les équilibres observés pour des valeurs élevées de Da et Re (nombre de Reynolds) sont bouleversés. En particulier, le rôle des corrélations entre gradients de vitesse et gradient scalaire $(\partial c / \partial x_i)(\partial u_i / \partial x_j)$ est largement modifié (Chakraborty et Swaminathan, PoF 2007, Mura et al., Combust. Theory Modelling 2008). La présentation se termine par l'introduction d'un critère permettant de délimiter les conditions pour lesquelles cette influence est susceptible d'être notable (Mura et Champion, Combust. Flame 2009). On conclut sur le fait que notre compréhension de l'influence des variations de densité sur le taux de mélange scalaire en présence de réactions chimiques (ou non), reste très encore imparfaite. De ce point de vue, on citera l'analyse récente conduite par Gonzalez et Paranthoen (Fluid

Dyn. Res. 2009) consacrée à l'influence d'un saut de densité qui met bien en évidence toute la complexité de cette question.

Références

N. Chakraborty, M. Champion, A. Mura, N. Swaminathan, Scalar Dissipation Rate transport approach, in: Lean Premixed Flames, Cambridge University Press (2010, to appear)

Discussions Questions

L'exposé suscite beaucoup de questions / discussions (influence des effets de Lewis, celui des variations du nombre de Schmidt, ou encore la caractérisation spectrale des fluctuations d'espèces réactives ...)

Dans le second exposé (Nicolas Enjalbert, Coria Rouen), un modèle de combustion turbulente pour la tabulation de la chimie détaillée dans un cadre LES est ensuite présenté. Il repose sur l'étude du mélange turbulent, au moyen de deux temps caractéristiques décrivant en tout point de l'écoulement l'histoire de celui-ci: un temps de résidence, ou âge, mesurant le temps passé par les particules depuis leur injection dans la zone où les réactifs se mélangent; et un temps de mélange, caractéristique de l'intensité moyenne de la turbulence « subie » par ces particules durant leur passage dans cette même zone. Le comportement de la fraction de mélange (scalaire passif) en fonction du temps de résidence revêt une forme particulière, que l'étude d'une configuration modèle aux petites échelles confirme être fondamentale: le temps de résidence est un marqueur pertinent pour suivre l'évolution macroscopique du mélange. A partir de ces résultats, un modèle stochastique discret de Partially Stirred Reactor (PaSR) est utilisé pour reproduire l'historique du mélange et générer les distributions de sous-maille désirées: les résultats obtenus sont tabulés selon ces deux temps de résidence et de mélange, ainsi que les moyennes des paramètres classiques que sont la fraction de mélange et la variable de progrès. Cette formulation est validée avec succès sur une configuration de flamme-jet méthane air liftée.

Références

- FlowControlled Detailed Chemistry Tabulation for the LargeEddy Simulation of NonPremixed Turbulent Combustion, N. Enjalbert, P. Domingo, L. Vervisch,

Proceedings of the 8th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Marseille, June 2010.

- FlowControlled Chemistry Tabulation for LargeEddy Simulation of turbulent combustion with detailed chemistry, N. Enjalbert, P. Domingo, L. Vervisch,

Proceedings of the 4th European Combustion Meeting, Vienna, April 2009.

Discussions Questions

Quelques discussions ont lieu quant à l'emploi de la représentation PaSR pour décrire localement ce type de flammes ou bien quant aux approximations retenues pour opérer l'intégration le long des trajectoires Lagrangiennes