

Simulation numérique directe de flammes de diffusion laminaires en microgravité

H.Y. WANG^a, S. ROUVREAU, P. CORDEIRO, G. LEGROS ET P. JOULAIN

Laboratoire de Combustion et de Détonique, CNRS UPR 9028-E.N.S.M.A., Université de Poitiers, 86960 Futuroscope Cedex, France

Reçu le 25 septembre 2003, accepté le 20 janvier 2004

Résumé – Une étude numérique est effectuée sur des brûleurs poreux qui simulent la combustion d'un combustible solide ou liquide. L'air et un mélange contenant 30 % d'O₂ et 70 % N₂ sont utilisés comme oxydant à des vitesses d'injection de 2,7 à 4 cm.s⁻¹ correspondant aux systèmes de conditionnement d'air des vaisseaux spatiaux. Le système des équations de Navier-Stokes et des équations de conservation des espèces est résolu par la simulation numérique directe. L'approche numérique est centrée sur l'influence du champ gravitationnel sur la géométrie de la flamme, les limites d'extinction et le transfert de chaleur de la flamme vers la surface du brûleur. Les résultats du modèle indiquent que l'état stationnaire en phase gazeuse soit atteint au bout de 2,5 s, correspondant à l'observation expérimentale.

Mots clés : Flamme de diffusion laminaire / simulation numérique directe / micro-gravité / flux thermique / processus transitoire

Abstract – **Direct numerical simulation of a laminar diffusion flame in micro-gravity environment.** A numerical investigation of a laminar diffusion flame established over a horizontal flat plate in micro-gravity environment is described. Fuel is injected through the burner and the oxidiser in a range of oxygen concentration from 23 to 30% is provided by a forced flow parallel to the surface at two velocities of 2.6 and 4 cm.s⁻¹. The three dimensional, time-dependent Navier-Stokes equations are solved using a finite difference method. Direct Numerical Simulation (DNS) is used to simulate the transition process of a laminar diffusion flame in micro-gravity environment. It is observed that after the imposition of the micro-gravity, the transition time is about 2.5 s for reducing an oscillated reacting flow to a forced boundary layer one. The model results reflect the qualitative features of the experiments.

Key words: Laminar diffusion flame / direct numerical simulation / micro-gravity / heat flux / transition process

1 Introduction

Différents épisodes tragiques de la conquête de l'espace ont montré que la notion de risque incendie était aussi à prendre en compte dans ces environnements sous gravité réduite. L'influence de l'injection et de l'écoulement externe sur la stabilité de flamme, et les sur-vitesses induites par des gradients de pression à l'entrée ont déjà été mises en évidence par les travaux de Hirano et al. [1], Lavid et al. [2] et Ramachandra et al. [3]. Les études citées ci-dessus ont en commun des vitesses d'écoulement de l'ordre de 1 m.s⁻¹. Ce choix est principalement guidé par la nécessité d'éliminer l'influence de la gravité. Des travaux de nature similaire ont été menés par

Torero et al. [4] dans un environnement à gravité réduite, permettant de mener les expérimentations aux vitesses d'écoulement inférieures à 0,2 m.s⁻¹. Ils ont pu montrer que pour des vitesses de l'ordre de 0,1 m.s⁻¹, l'épaisseur de flamme est plus importante, d'un ordre de grandeur que celle prédite par analyse de Shvab-Zeldovich. Ils ont également observé expérimentalement l'influence du mouvement relatif des injections par rapport à l'écoulement principal sur la forme de flamme de diffusion. Dans cette étude, notre objectif est principalement de vérifier la validité des approches numériques et d'appréhender et caractériser les phénomènes contrôlant la géométrie d'une flamme de diffusion laminaire qui s'établit sur une surface combustible, à la fois à la gravité terrestre et sous des environnements sous gravité réduite. Cette étude présente un double intérêt théorique, pour les aspects

^a Auteur correspondant : wang@lcd.ensma.fr

fondamentaux liés à la compréhension des phénomènes de combustion, et pratique afin de mieux prévenir les risques d'incendie dans les véhicules spatiaux en orbite.

2 Analyse théorique

Le système d'équations en coordonnées cartésiennes régissant l'écoulement réactif peut être mis sous la forme compacte suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (2)$$

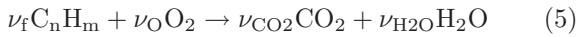
$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{u} = \dot{q}_c''' + \nabla \cdot \lambda \nabla T - \nabla \cdot \mathbf{q}_r \quad (3)$$

$$p_0 = \mathcal{R} \rho T \sum_i \frac{Y_i}{W_i} \quad (4)$$

Les variables sont respectivement : la masse volumique, ρ , vecteur vitesse, \mathbf{u} , pression, p , enthalpie, h , le tenseur des contraintes, $\boldsymbol{\tau}$, le taux de production de chaleur par unité de volume libérée par la combustion, \dot{q}_c''' , et la source radiative, \mathbf{q}_r . Le coefficient de diffusion moléculaire de l'espèce i , la viscosité dynamique du mélange, et la conductivité thermique du mélange sont définis par McGrattan et al. [5].

2.1 Modèle de la combustion

Deux modèles de combustion, basés sur l'hypothèse d'une réaction irréversible sont retenus



Dans la première approche, on est alors ramené à la résolution des équations différentielles suivantes :

$$\frac{\partial \rho Y_f}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_f) \mathbf{u} = \nabla \cdot (\rho D_f) \nabla Y_f + \dot{W}_f''' \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho Y_o}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_o) \mathbf{u} = \nabla \cdot (\rho D_o) \nabla Y_o + s \dot{W}_f''' \quad (7)$$

où les termes sources sont déterminés par des lois d'Arrhénius

$$\dot{W}_f''' \equiv \frac{d[Y_f]}{dt} = -A[Y_f]^a[Y_o]^b e^{-E/RT} \quad (8)$$

Les coefficients des lois d'Arrhénius A , E , a et b sont donnés par Westbrook et al. [6]. Le paramètre s représente le rapport stoechiométrique,

$$s = \frac{\nu_o M_o}{\nu_f M_f} \quad (9)$$

où M représente la masse molaire. Le taux de chaleur, \dot{q}_c''' est directement proportionnel au taux de consommation du combustible

$$\dot{q}_c''' = -\Delta H_f \dot{W}_f''' \quad (10)$$

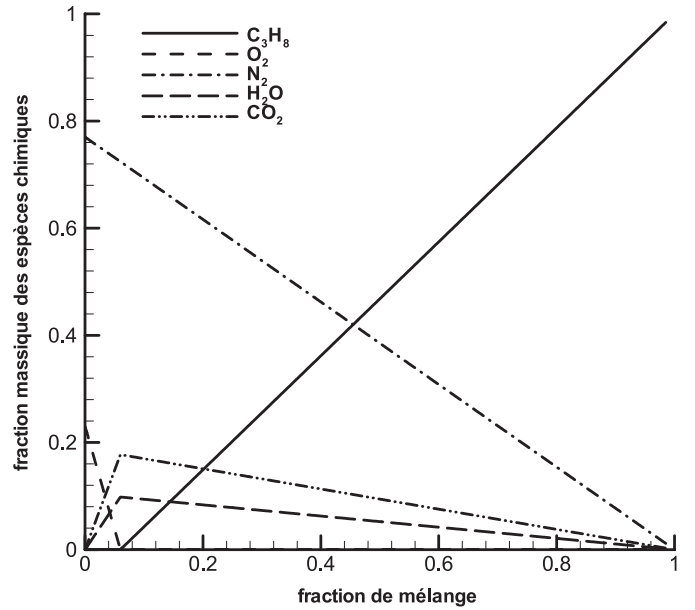


Fig. 1. Relations d'état entre la fraction de mélange et les fractions massiques des espèces chimiques (propane-air) menées par McGrattan et al. [5].

Cette approche permet la modélisation d'une chaîne complète du processus de l'initiation, à la propagation et à l'extinction. L'inconvénient d'une telle modélisation est qu'elle est coûteuse. Ceci est dû aux temps de calcul très longs qu'implique la résolution des termes sources reconnus pour avoir des variations très rapides.

La seconde approche est basée sur l'équation de la fraction de mélange, ce qui suppose une réaction chimique infiniment rapide

$$\rho \frac{DZ}{Dt} = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{Sc} \right) \nabla Z \quad (11)$$

La fraction de mélange est définie de façon classique,

$$Z = \frac{s Y_f - (Y_o - Y_o^\infty)}{s Y_f^\infty + Y_o^\infty} \quad (12)$$

La position de la flamme est définie par la valeur à la stoechiométrie. Le taux de consommation de l'oxygène résulte de la combinaison des bilans de fraction massique d'oxygène et de fraction de mélange.

$$-\dot{W}_o''' = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{Sc} \right) \frac{dY_o}{dZ} \nabla Z - \frac{dY_o}{dZ} \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{Sc} \right) \nabla Z \quad (13)$$

La dérivée, dY_o/dZ , qui apparaît dans l'équation (13), est donnée par une relation d'état, comme illustrée sur la figure 1. Le taux de chaleur libéré par unité de volume par la combustion est directement proportionnel au taux de consommation de l'oxygène :

$$\dot{q}_c''' = -\Delta H_o \dot{W}_o''' \quad (14)$$

2.2 Méthode numérique

Pour la discrétisation temporelle, on utilise un processus de mise à jour des variables de l'écoulement en fonction du temps basé sur l'algorithme explicite du second ordre de type Runge-Kutta. Pour une variable quelconque en terme instationnaire :

$$\frac{d\phi}{dt} = f(\phi, t) \quad (15)$$

avec la condition initiale, $\phi(0) = \phi^0$. La procédure de prédiction-corrrection peut être décomposée comme suit. Dans la phase prédictor, les variables thermodynamiques sont estimées au pas de temps suivant par un schéma Euler explicite du 1^{er} ordre

$$\phi^{(n+1)_e} = \phi^n + \delta t f(\phi^n, t^n) \quad \text{avec } t^n = n\delta t \quad (16)$$

Dans la phase correcteur, les mêmes variables sont rectifiées pour le pas de temps suivant

$$\phi^{n+1} = \frac{1}{2} \left[\phi^n + \phi^{(n+1)_e} + \delta t f(\phi^{(n+1)_e}, t^n + \delta t) \right] \quad (17)$$

Les dérivées spatiales sont discrétisées sur un maillage rectiligne. Les variables scalaires sont localisées au centre des mailles, et celles vectorielles sur les faces des mailles. Pour la discrétisation des termes convectifs, nous utiliserons alors un schéma aux différences finies amont biaisées dans la partie prédiction et celui aval dans la partie correction

$$(\mathbf{u} \cdot \nabla \rho)_{ijk} = \frac{1 \mp \varepsilon_u}{2} u_{ijk} \frac{\rho_{i+1,jk} - \rho_{ijk}}{\delta x} + \frac{1 \pm \varepsilon_u}{2} u_{i-1,jk} \frac{\rho_{ijk} - \rho_{i-1,jk}}{\delta x} + \dots \quad (18)$$

où ε_u est le nombre de CFL local sur l'axe x , défini,

$$\varepsilon_u = \frac{u\delta t}{\delta x} \quad (19)$$

La fraction massique de combustible à la surface de la paroi en combustion ($Y_{f,s} < 1$) est tirée de la conservation de masse locale :

$$(1 - Y_{f,s})\dot{m}_s = -D_f \frac{dY_{f,s}}{dz} - \Delta t u_s \frac{d(\dot{m}_s Y_{f,s})}{dz} \quad (20)$$

2.3 Équation de transfert radiatif dans les milieux semi-transparents fluides

La luminance I est tirée de l'équation du transfert radiatif :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\Omega} I + \kappa I = \kappa \frac{\sigma T^4}{\pi} \quad (21)$$

La méthode des ordonnées discrètes, schématisée sur la figure 2, est utilisée permettant une très bonne

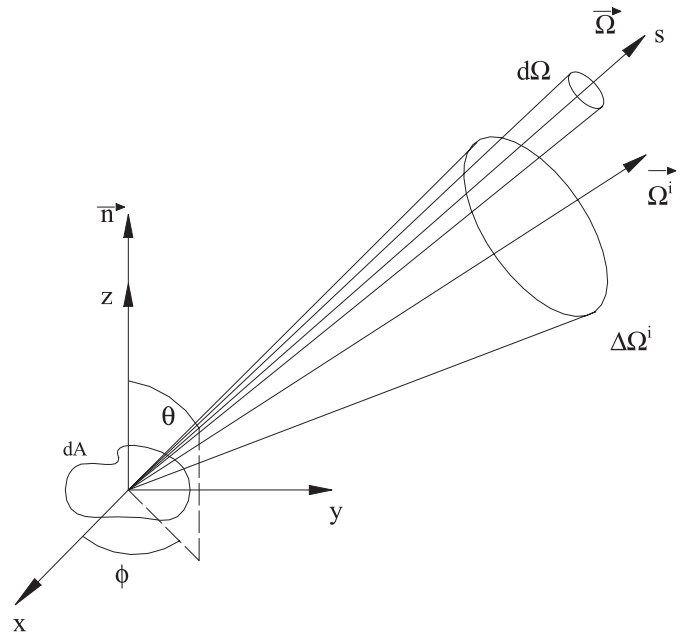


Fig. 2. Élément de la discrétisation angulaire.

évaluation du flux rayonné à introduire dans l'équation de l'énergie (3)

$$-\nabla \cdot \mathbf{q}_r(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}) [U(\mathbf{x}) - 4\pi I_b(\mathbf{x})] \quad \text{avec } U(\mathbf{x}) = \int_{4\pi} I(\mathbf{x}, \mathbf{s}) d\Omega \quad (22)$$

La résolution de l'équation (21) doit être complétée par les conditions limites à la paroi grise,

$$I_w(\mathbf{s}) = \varepsilon_w I_{bw} + \frac{1 - \varepsilon_w}{\pi} \int_{\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w < 0} I_w(\mathbf{s}') |\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n}_w| d\Omega \quad (23)$$

Dans cette méthode, l'espace angulaire est partagé en un nombre N fini d'angles solides Ω^l , chacun associé à une direction centrale Ω^l . La méthode des ordonnées discrètes consiste à suivre l'évolution de l'énergie radiative contenue dans $\Delta\Omega^l$ lors de la traversée du milieu semi-transparent.

Enfin, l'étude de Kent et al. [7] a dégagé une méthode permettant la détermination du coefficient d'absorption :

$$\kappa = 266c f_v T \quad (m^{-1}) \quad (24)$$

où c est une constante ($c = 7$) et la fraction volumique des suies choisie comme $f_v = 5 \times 10^{-7}$.

3 Résultats et commentaires

Les coordonnées pour la simulation numérique et la géométrie du brûleur sont présentées sur la figure 3. Un maillage de 200 000 points, soit 100 (x) \times 45 (y) \times 50 (z), a permis de capturer la structure fine de la flamme. En premier, on se place dans les conditions particulières où

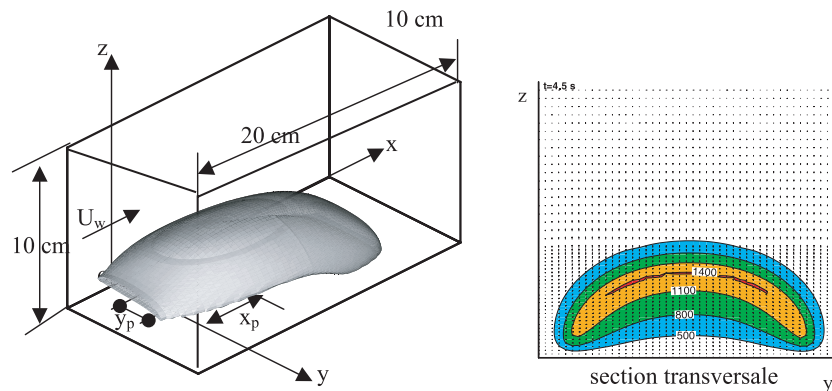


Fig. 3. Structure de la flamme instantanée en micro-gravité, et le système des coordonnées pour la simulation numérique.

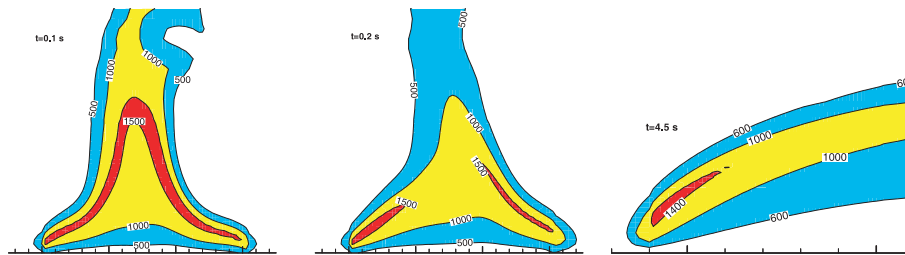


Fig. 4. Évolution du front de la flamme pour $U_w = 4 \text{ cm.s}^{-1}$ et $Y_o = 23 \%$.

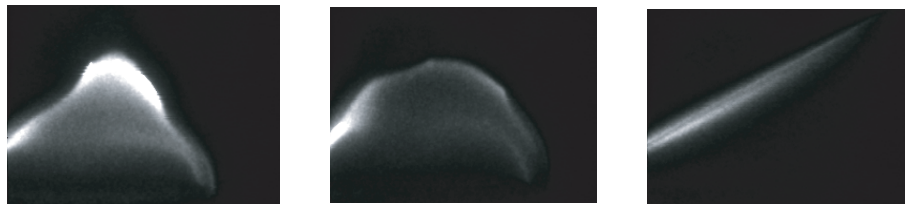


Fig. 5. Évolution des mesures d'émission CH.

le débit d'injection du combustible est découplé du transfert de chaleur. L'approche numérique est centrée sur l'influence des forces d'inertie sur la géométrie de la flamme, quand la gravité passe de $9,8 \text{ m.s}^{-2}$ ($t < 0 \text{ s}$) à 0 ($t = 0 \text{ s}$). L'air et un mélange contenant 30% d' O_2 et 70% N_2 sont utilisés comme oxydant à des vitesses d'injection de $2,7$ à 4 cm.s^{-1} . L'allumage est effectué à $t = -2 \text{ s}$ en gravité normale à l'aide d'un point chaud portant à $1600 \text{ }^\circ\text{C}$ pendant 1 s sur le brûleur au bord de fuite. La prédiction de la structure d'une flamme de diffusion laminaire établie au-dessus d'un brûleur ($x_p = 6 \text{ cm}$ et $y_p = 5 \text{ cm}$), dans des conditions de micro-gravité en présence d'un écoulement oxydant parallèle à la-dite surface est illustrée sur la figure 3. Aux faibles vitesses, l'action combinée du soufflage de combustible et de l'expansion thermique peut conduire à une flamme de diffusion détachée de la paroi poreuse en aval et à la formation d'une flamme tri-dimensionnelle.

Pour $t = 0 \text{ s}$, la gravité est brutalement ramenée à 0 , c'est le début du régime transitoire. Après l'imposition de la microgravité à $t = 0 \text{ s}$, la structure transitoire des flammes de diffusion est mise en évidence sur la figure 4 pour $U_o = 4 \text{ cm.s}^{-1}$ et $Y_o = 0,23$. Les mesures d'émission CH correspondante à une zone réactive sont illustrées sur la figure 5. Au niveau de la prédiction de la structure de

flamme transitoire (cf. Fig. 4), la comparaison avec les mesures d'émission CH (cf. Fig. 5) est qualitativement satisfaisante. Dans le régime transitoire, la forme de flamme visible évolue progressivement du type feu de nappe au type de couche limite entre $t = 0,1$ et 2 s . La transition vers le régime stationnaire se caractérise par une flamme de type couche limite en phase gazeuse. Il semble que l'état stationnaire en phase gazeuse est atteint au bout de $2,5 \text{ s}$. La distance flamme-paroi semble importante à une distance du bord d'attaque voisine de 10 mm lorsque la vitesse de l'écoulement oxydant est faible. Les fractions massiques oxygène/combustible en régime transitoire sont présentées sur la figure 6. On s'aperçoit qu'après imposition de la microgravité, la flamme dévie l'écoulement oxydant et l'empêche d'atteindre la zone réactive au bord de fuite. Le déplacement du front de flamme (cf. Fig. 4), dû au déplacement de la zone de mélange entre l'oxydant et le combustible apparaît clairement. Ces phénomènes sont amplifiés par l'accroissement de la teneur en oxygène et donc de la température de flamme, ainsi que par la diminution de la vitesse d'écoulement principal.

Lorsque l'écoulement est établi ($t > 3 \text{ s}$) en microgravité, plusieurs cas de figure sont simulés pour la même configuration du brûleur, à l'aide d'une approche de type

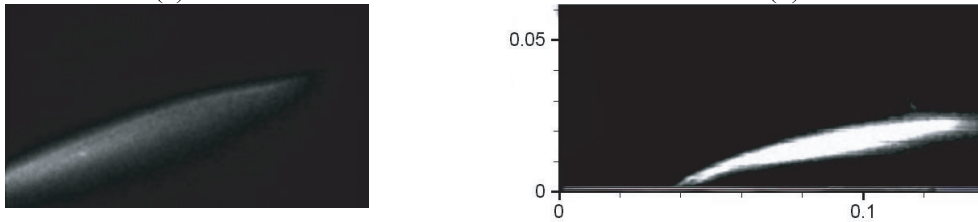
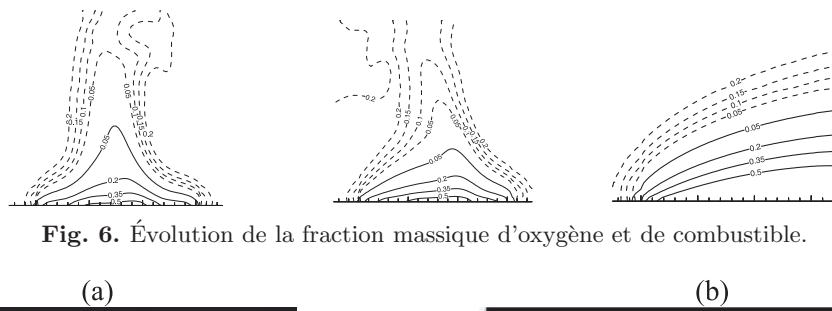


Fig. 7. Structure de la flamme instantanée en micro-gravité dans le plan médian (x, z), (a) expérimental; (b) calcul à l'aide d'une approche de type fraction de mélange.

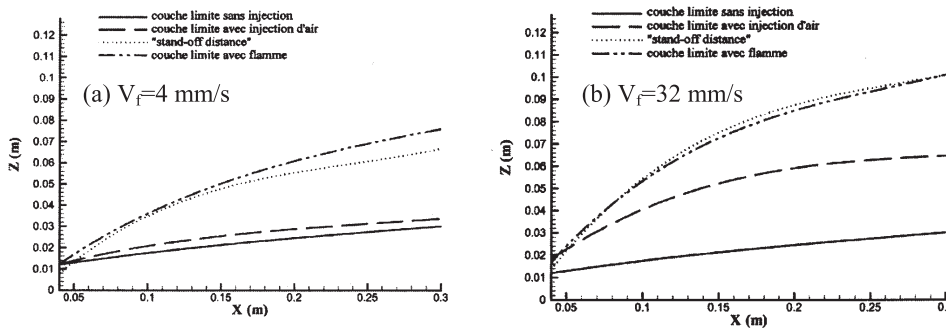


Fig. 8. Influence de l'injection sur le développement de la couche limite.

fraction de mélange qui est beaucoup moins coûteuse. Au niveau de la prédiction de la structure de flamme stationnaire (cf. Fig. 7b), la comparaison avec l'expérience (cf. Fig. 7a) est qualitativement satisfaisante. L'influence de l'injection seule et du dégagement de chaleur lié à la réaction de combustion sur le développement de la couche limite est mise en évidence par les figures 8a, b. Dans le cas d'une faible vitesse d'injection ($V_f = 4 \text{ mm.s}^{-1}$), l'injection d'air n'a qu'une très faible influence sur l'épaisseur de couche limite qui n'est augmentée que de 8 % environ. En revanche, la présence de la flamme augmente de près de 2,5 fois de cette épaisseur. Dans ce cas, la ligne de vitesse maximum est bien au-dessus de la zone de réaction. Notons également qu'une forte vitesse d'injection ($V_f = 32 \text{ mm.s}^{-1}$) contribue à épaissir de façon notable la couche limite. L'épaississement est alors de 90 % à proximité du bord d'attaque du poreux et approche les 140 % plus en aval. Il apparaît aussi que l'épaississement de la couche limite dû à la présence de la flamme dans ces conditions est presque triplé. Enfin signalons que la ligne de vitesse maximum passe juste sous la zone réactive dans la moitié du domaine aval.

Nous nous sommes également intéressés à l'évaluation des flux de chaleur convectif (cf. Fig. 9a) et radiatif (cf. Fig. 9b) en retour vers la surface, en aval du brûleur en

régime transitoire. Jusqu'à présent, il semble difficile de mesurer le flux thermique en microgravité pour valider le modèle numérique. En régime transitoire la flamme au bord de fuite est proche de la surface et le flux convectif en retour flamme-surface est important. En régime stationnaire ($t > 2 \text{ s}$), la contribution du rayonnement devient importante. Bien entendu, ce type de perturbation due au changement de régime s'avère capital dans la mesure où il affecte le flux de chaleur en retour vers la surface combustible venant de la flamme et par conséquent la géométrie, les dimensions et la stabilité de cette dernière. En régime stationnaire, le flux convectif en retour diminue, la flamme s'allonge, et donc rayonne beaucoup plus le long de la paroi. Lorsque la flamme de type couche limite s'établit, le flux convectif en retour est plus faible.

4 Conclusion et perspectives

La combinaison des approches expérimentales et numériques a permis de rendre compte des observations faites à différents temps caractéristiques. La perturbation de flamme en régime transitoire s'avère capitale dans la mesure où elle affecte le flux de chaleur en retour vers la surface combustible. La modélisation de ce type

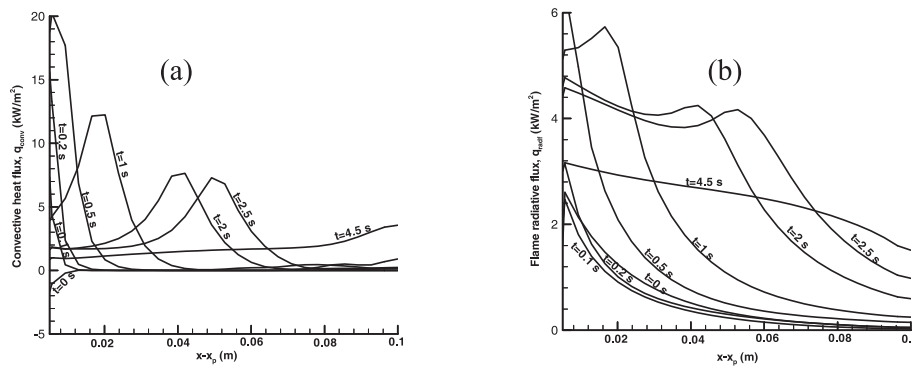


Fig. 9. Évolution du flux de chaleur convectif (a) et radiatif (b) ($U_w = 2,7 \text{ cm.s}^{-1}$ et $Y_o = 30 \%$).

d'écoulement réactif à très faible vitesse reste beaucoup à faire au niveau de la prise en compte des phénomènes liés à la formation des suies en micro-gravité. Le calcul du champ de suie passe par résolution de deux équations de transport (convection/diffusion), dont les termes source nucléation/agglomération/oxydation se présentent sous la forme de lois d'Arrhénius dont les paramètres ont pu être évalués empiriquement sur un certain nombre de flammes gazeuses (méthane, éthylène, propane). Dans le cas d'un champ polydispersé, comprenant des particules de tailles différentes, le champ de suies est défini à partir de deux variables : la fraction massique de suie, et le nombre de particules par unité de volume. De toute évidence, les travaux numériques devront s'accompagner d'avancées significatives au niveau des diagnostics pour être validés, ce qui est le principal objectif des études en cours. Les études de base sur la combustion des solides dans des environnements à gravité réduite, vont se poursuivre, afin d'aboutir à une détermination réaliste des critères d'inflammabilité et de combustion des matériaux combustibles utilisés dans l'espace. L'objectif est d'aller à un niveau de détail permettant de prendre en compte l'influence de la pulsation, l'oscillation et l'apparition d'instabilités dans de telles flammes sur les transferts de chaleur, et par conséquent, sur les processus successifs qui mènent à la pyrolyse puis à la gazéification du combustible.

Références

- [1] T. Hirano, K. Iwai, Kanno, Measurement of the Velocity Distribution in the Boundary Layer over a Flat Plate with a Diffusion Flame, *Astronautica Acta* 17 (1972) 811–818
- [2] M. Lavid, A.L. Berlad, Gravitational Effects on Chemically Reacting Boundary Layer Flows over a Horizontal Flat Plate, 16th Symposium (International) on Combustion, Pittsburgh: The Combustion Institute, 1976, pp. 1157–1568
- [3] A. Ramachandra, B.N. Raghumandan, Investigation on the Stability and Extinction of a Laminar Diffusion Flame over a Porous Flat Plate, *Comb. Sci. and Tech.* 75 (1991) 241–260
- [4] J.L. Torero, L. Bonneau, J.M. Most, P. Joulain, The Effect of Gravity on a Laminar Diffusion Flame Established over a Horizontal Flat Plate, 25th Symposium (International) on Combustion, Pittsburgh: The Combustion Institute, 1995, pp. 1701–1709
- [5] K.B. McGrattan, P.F. Glenn, E.F. Jason, Fire Dynamics Simulator – Technical Reference Guide, NIST Technical Report, 2000
- [6] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, *Comb. Science and Technology* 27 (1981) 31–43
- [7] J.H. Kent, D.R. Honnery, *Combustion and Flame*, 79 (1990) 287–298