



HAL
open science

Modélisation par la Fonction Densité de Probabilité du mélange de produits inertes ou réactifs par une turbulence homogène

Fabienne Pit, Mathieu Mory, Pascal Bruel

► **To cite this version:**

Fabienne Pit, Mathieu Mory, Pascal Bruel. Modélisation par la Fonction Densité de Probabilité du mélange de produits inertes ou réactifs par une turbulence homogène. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. <hal-03362481>

HAL Id: hal-03362481

<https://hal.science/hal-03362481v1>

Submitted on 1 Oct 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

Modélisation par la Fonction Densité de Probabilité du mélange de produits inertes ou réactifs par une turbulence homogène

Fabienne Pit¹, Mathieu Mory¹ et Pascal Bruel²

Université de Pau et des Pays de l'Adour

¹Laboratoire de Thermique, Energétique et Procédés

ENSGTI, BP 7511, 64075 PAU Cédex - France

fabienne.pit@univ-pau.fr

²Laboratoire de Mathématiques et de leurs Applications

UMR 5142 CNRS-UPPA – IPRA, BP 1155

64000 PAU Cédex - France

Résumé :

On présente un modèle pour simuler le mélange turbulent et la réaction chimique. L'approche utilise des particules fluides élémentaires (PFE) où la concentration est homogène. Ces particules sont regroupées au sein de macro-particules fluides (MPF). Par une méthode de type Monte-Carlo, l'évolution temporelle des concentrations est simulée par différents processus : (i) la réaction chimique au sein des PFE, (ii) la diffusion moléculaire au sein des MPF, (iii) des déplacements de PFE internes aux MPF, (iv) des déplacements externes de PFE entre MPF. Les deux derniers processus utilisent le modèle du tourbillon linéaire (Kerstein, 1991). La capacité du modèle à simuler le mélange et la réaction chimique dans une turbulence stationnaire et homogène est démontrée en comparant les résultats du modèle avec ceux de simulations numériques directes de Eswaran et Pope (1988) en l'absence de réaction chimique et ceux de McMurtry et Givi (1989), dans le cas avec réaction.

Abstract :

A model is presented which simulates turbulent mixing and chemical reaction. It is based on elementary fluid particles (EFP), in which concentration is homogenous, gathered in macro fluid particles (MFP). Using a Monte-Carlo technique, the time evolution of concentrations is simulated by different processes : (i) the chemical reaction in EFP, (ii) the molecular diffusion achieved in MFP, (iii) internal displacements of EFP in MPF, (iv) external displacements of EFP between MFP. The two latter processes are performed using the turbulent eddy model (Kerstein, 1991). The ability of the model to simulate mixing and chemical reaction in stationary and homogeneous turbulence is shown by comparing the results of our model to those of direct numerical simulations, by Eswaran and Pope (1988) for non-reacting fluid particles, and by McMurtry and Givi (1989) for reacting particles.

Mots-clefs : mélange de particules réactives ; modèle du tourbillon linéaire ; turbulence homogène.

1 Introduction

La présente contribution s'inscrit dans le cadre des efforts destinés à développer des modèles performants permettant de prévoir les propriétés de mélange entre espèces inertes et/ou réactives dans un écoulement turbulent monophasique. La prévision correcte de l'évolution spatiale et temporelle de la fonction densité de probabilité (FDP) des concentrations en produits inertes ou réactifs considérés représente l'objectif ultime de ce type de modélisation. On présente dans cet article un modèle fondé sur la modélisation des interactions entre particules fluides contenues dans un domaine. Les particules fluides (Macro Particules Fluides - MPF)

sont des agrégats constitués de Particules Fluides Élémentaires (PFE) dans lesquelles la concentration de champs scalaires est uniforme. L'évolution dans le temps des champs scalaires résulte des échanges entre PFE, des réactions chimiques entre constituants qui peuvent s'opérer au sein des PFE et de la diffusion moléculaire.

Le modèle met en œuvre des processus simples. Le mélange des champs scalaires résulte du processus de diffusion moléculaire entre PFE ordonnées au sein de chaque MPF. Les processus de diffusion sont accélérés par les déplacements cinématiques des PFE au sein des MPF qui modifient l'ordre des PFE et accentuent les gradients de champs scalaires dans les MPF. Ces déplacements cinématiques sont générés par la turbulence. Le modèle est fondé sur le Modèle du Tourbillon Linéaire (Kerstein, 1991) mis en œuvre d'une part, au sein des MPF (Brassage Interne) et, d'autre part, entre des paires de macro particules fluides (Brassage Externe) de manière à permettre un échange cinématique entre particules fluides.

On présente dans cet article les principes du modèle, en se focalisant sur la modélisation des déplacements cinématiques et son articulation avec le processus de diffusion. Le modèle est ainsi naturellement appliqué à la configuration d'un réacteur agité dans lequel il n'y a pas d'écoulement moyen et où seule existe une turbulence stationnaire, homogène et isotrope. Cette turbulence est caractérisée par son énergie cinétique k et son échelle intégrale L_t . Le fluide est supposé être constitué de deux espèces A et B. Le champ scalaire est initialisé sous la forme de deux types d'agrégats en même nombre, les uns contenant uniquement le constituant A (i.e. concentrations $\phi_{A0}=1$ et $\phi_{B0}=0$) et les autres uniquement du constituant B (concentrations $\phi_{A0}=0$ et $\phi_{B0}=1$). Les constituants peuvent éventuellement réagir et dans ce cas on suppose que la réaction chimique est d'ordre 1 par rapport aux concentrations en constituants A et B. En introduisant α la constante de la réaction, le temps chimique associé s'exprime alors par $\tau_c=1/\alpha\phi_{A0}$. Pour les conditions de turbulence stationnaire homogène et isotrope considérées dans cette étude, le système est complètement décrit par la donnée des trois nombres sans dimension que sont le nombre de Reynolds $Re_t = \sqrt{k}L_t/\nu$, le nombre de Schmidt $Sc=\nu/D$, et le nombre de Damköhler $Da = \tau_t/\tau_c$. Ces quantités font intervenir la viscosité cinématique ν du fluide, le coefficient de diffusion moléculaire D des produits A et B et le temps de retournement de la turbulence $\tau_t = L_t/k^{1/2}$. On se limite ici à l'étude de deux cas : celui du mélange non-réactif, puis celui où les espèces A et B réagissent avec une cinétique instantanée ($Da \rightarrow \infty$) de sorte que les produits A et B ne peuvent pas coexister au sein des PFE.

2 Présentation du modèle

Le modèle repose sur la manipulation de Particules Fluides Élémentaires (PFE), dans lesquelles les champs scalaires restent homogènes, ordonnées au sein d'agrégats appelés Macro Particules Fluides (MPF). L'homogénéité requise au sein des PFE impose que leur taille soit donnée par l'échelle de Batchelor $\eta_B = L_t.Sc^{-1/2}.Re_t^{-3/4}$. Pour représenter l'interaction des structures turbulentes de toutes tailles avec les MPF, on suppose que la taille de ces dernières est celle de l'échelle intégrale de la turbulence L_t . Le nombre de PFE ordonnées au sein d'une MPF est donc fixé par le nombre de Reynolds et le nombre de Schmidt : $N_{PFE} = Sc^{1/2} Re_t^{3/4}$. L'homogénéisation à petite échelle des champs scalaires au sein des MPF se produit par la diffusion moléculaire. Afin de modéliser l'effet cinématique de tous les tourbillons de taille ℓ sur le champ scalaire, deux processus basés sur le modèle du tourbillon linéaire de Kerstein (1991) sont introduits. L'application de ces deux processus dénommés brassage interne (BI) et brassage externe (BE) conduit soit à modifier l'ordre de certaines PFE au sein d'une MPF (BI) soit à échanger et réorganiser certaines PFE entre deux MPF (BE). Dans le cas du brassage interne, celui-ci est appliqué simultanément à toutes les MPF contenues dans le domaine à une

fréquence $f_{BI} = 1/\tau_{BI}$. La taille ℓ des tourbillons linéaires appliqués varie d'une MPF à l'autre et est répartie de manière à satisfaire la distribution de probabilité donnée par Kerstein (1991), soit :

$$f(\ell) = \frac{5}{3} \frac{\ell^{-8/3}}{\eta^{-5/3} - L_i^{-5/3}}$$

où η désigne l'échelle de Kolmogorov. Les déplacements cinématiques produits par le tourbillon reviennent alors à transférer les variations spatiales des champs scalaires vers les plus petites échelles auxquelles la diffusion moléculaire est à même d'homogénéiser le scalaire. En analysant le taux de transfert vers les petites échelles par le tourbillon linéaire, Pit *et al.* (2007) ont établi que, pour une turbulence homogène et isotrope, la période τ_{BI} de l'application du modèle de brassage interne doit être choisie telle que $\tau_{BI} = 0,063.Sc^{1/3}.Re_i^{-1/6}\tau_i$. La figure 1 précise les différentes étapes d'application du brassage interne destiné à reproduire l'effet cinématique d'un tourbillon de taille ℓ sur une MPF. L'ordre des PFE au sein de la MPF est modifié suivant un processus en trois étapes. La première étape sélectionne un segment de longueur ℓ , la seconde correspond à l'application du tourbillon linéaire sur le segment sélectionné, et la troisième correspond au remplacement de ce segment au sein de la MPF. Les gradients de concentration sont représentés sur la Fig. 1 par les variations spatiales de niveaux de gris et on voit donc clairement que le tourbillon linéaire accroît les gradients de champs scalaires au sein de la MPF.

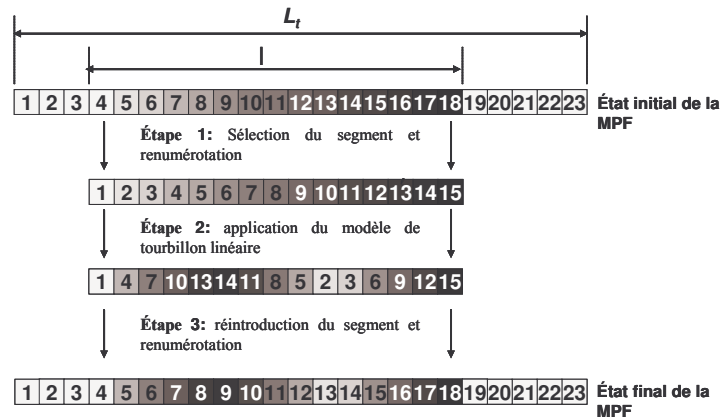


FIG. 1 – Brassage interne : modification du champ scalaire au sein d'une particule fluide par l'action du tourbillon linéaire.

Le brassage externe correspond quant à lui à l'application simultanée, à la fréquence $f_{BE} = 1/\tau_{BE}$, du modèle du tourbillon linéaire aux $N_{MPF}/2$ paires de MPF constituées de manière aléatoire parmi les N_{MPF} macro particules fluides contenues dans le domaine. Pour chaque paire considérée, un segment constitué de la réunion de deux sous segments sélectionnés au sein des deux MPF se voit appliquer le tourbillon linéaire. Le segment ainsi modifié est alors recoupé en deux sous-segments (de longueurs identiques à celles des sous-segments initiaux) qui sont replacés au sein de chacune des deux MPF. Ce brassage externe est ainsi le seul processus du modèle qui permette un échange de particules fluides élémentaires entre MPF. La modification du champ scalaire est moins brutale que celle qui résulterait de l'application d'un processus de type Coalescence/Dispersion comme le modèle de Curl (1963) car la variation de la composition au sein des PFE reste associée uniquement à l'effet de la diffusion moléculaire agissant entre les PFE déplacées. Enfin, l'équation de diffusion (espèces inertes) ou de diffusion-réaction (espèces réactives) est résolue en parallèle au sein de chaque MPF en considérant celle-ci comme un domaine unidirectionnel de longueur et de période L_i . Les

simulations présentées dans cet article ont toutes été réalisées pour un nombre de Schmidt $Sc=1$ et un nombre de Reynolds turbulent $Re_t = 93$. Dans ce cas, les périodicités avec lesquelles sont appliquées les processus de brassage interne et externe sont données par $\tau_{BI}/\tau_t = 0,03$ et $\tau_{BE}/\tau_t = 0,2$. Le nombre total de MPF est de $N_{MPF}=10000$ et chacune d'entre elles est constituée de $N_{PFE}=30$ particules fluides élémentaires.

3 Simulation du mélange de particules fluides non réactives

Les résultats de la simulation du mélange de macro particules fluides non-réactives ($Da = 0$) dans un réacteur où règne une turbulence homogène et stationnaire ont été comparés avec ceux de simulations numériques directes obtenus par Eswaran et Pope (1988). La Figure 2 permet d'observer à deux instants différents la morphologie de la fonction de densité de probabilité $P(\phi_J; t)$ où la variable de Schwab-Zeldovich J est telle que $\phi_J = \phi_A - \phi_B$. Le bon accord observé avec les résultats issus de la DNS est confirmé par l'observation d'une dynamique quasi-identique reliée à l'évolution temporelle des différents moments associés à cette FDP. Ainsi, l'observation par exemple de la courbe de la figure 3 représentant l'évolution du coefficient d'aplatissement en fonction du temps réduit $t^* = -\ln \sqrt{\sigma_J^2(t)/\sigma_J^2(t=0)}$ montre que les résultats obtenus par l'application du présent modèle sont en bien meilleur accord avec les résultats de DNS que ce qui est obtenu avec d'autres modèles de mélange comme le modèle de Curl (1963) ou celui de Janicka *et al.* (1979).

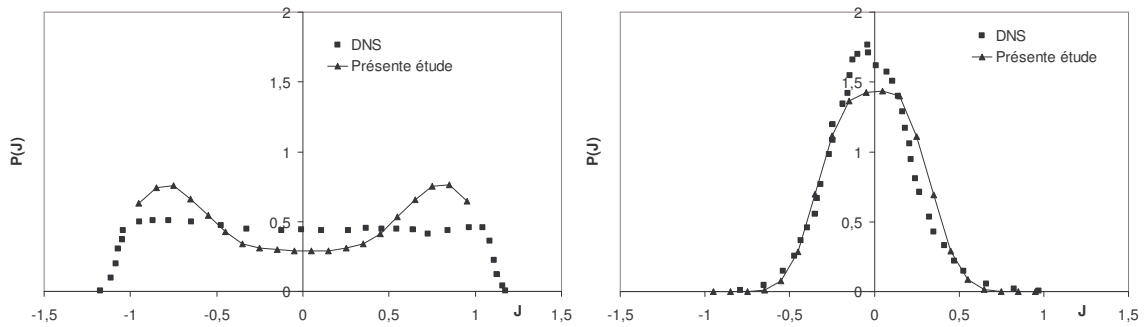


FIG. 2 – Simulation du mélange de deux espèces inertes : évolution temporelle de la fonction densité de probabilité de la variable de Schwab-Zeldovich J : (a). $t/\tau_t = 1,49$; (b). $t/\tau_t = 3,47$.

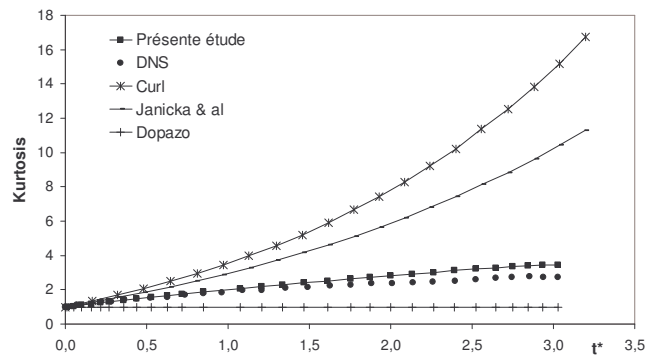


FIG. 3 – Simulation du mélange de deux espèces inertes : évolution temporelle du coefficient d'aplatissement de la variable de Schwab-Zeldovich J.

4 Simulation du mélange de particules réactives

Pour les mêmes conditions initiales que celles considérées précédemment, mais cette fois-ci pour des espèces A et B réagissant instantanément ($Da \rightarrow \infty$, les constituants A et B ne peuvent donc pas coexister dans une PFE), les résultats obtenus par l'application du présent modèle ont été comparés avec ceux issus des simulations numériques directes de McMurtry et Givi (1989).

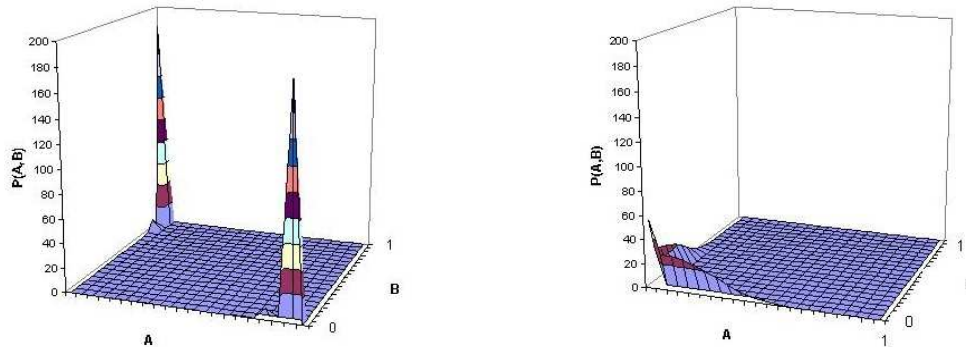


FIG. 4 – Mélange de deux espèces réactives A et B pour $Da \rightarrow \infty$: deux exemples de morphologie de la fonction densité de probabilité jointe $P(\phi_A, \phi_B; t)$ à deux instants différents :

a) $t/\tau_t = 0,46$ et b) $t/\tau_t = 3,47$.

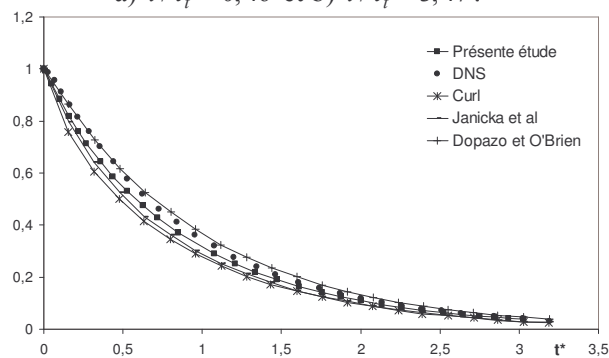


FIG. 5 – Mélange de deux espèces réactives A et B pour $Da \rightarrow \infty$: évolution temporelle de $\langle \phi_A \rangle(t) / \langle \phi_A \rangle(0)$.

La disparition progressive des deux espèces A et B est clairement visible sur l'évolution temporelle de la fonction densité de probabilité jointe $P(\phi_A, \phi_B; t)$ représentée pour deux instants différents sur la figure 4. Comme le montre la figure 5, le tracé de l'évolution temporelle de la concentration réduite moyenne en espèce A $\langle \phi_A \rangle(t) / \langle \phi_A \rangle(0)$ en fonction de t^* ne semble pas mettre en évidence de différences notables entre les résultats de simulations basés sur l'utilisation du présent modèle et ceux fournis par le recours à d'autres modèles de mélange. Si l'on cherche maintenant à analyser les autres propriétés statistiques associées à cette concentration moyenne, la situation est alors beaucoup plus contrastée. En effet, si l'on s'attache à traduire l'évolution temporelle de la fonction de densité de probabilité $P(\phi_j; t)$ à travers le tracé de l'évolution temporelle de ses premiers moments, il apparaît tout à fait clairement que les résultats obtenus par l'utilisation du présent modèle sont en bien meilleur accord avec ceux fournis par la DNS que ce qui est observé pour les autres modèles de mélange. En effet, que ce soit pour l'évolution temporelle du coefficient de déviation ou d'aplatissement représentée sur la

figure 6, les autres modèles de mélange surestiment considérablement ces deux coefficients alors que le présent modèle fournit des résultats tout à fait satisfaisants.

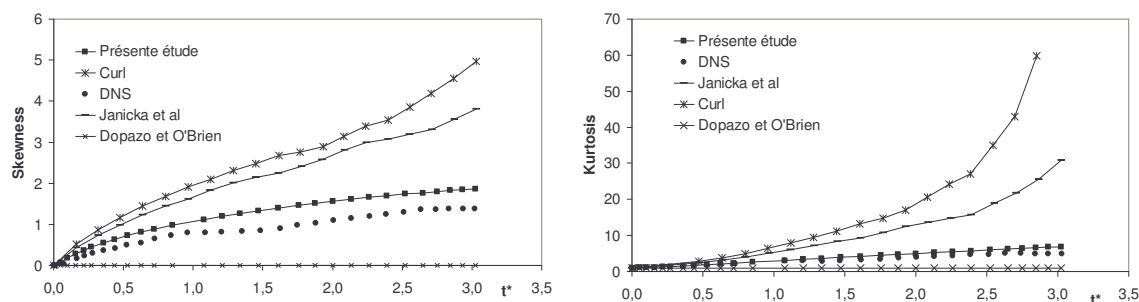


FIG. 6 – Mélange de deux espèces réactives A et B pour $Da \rightarrow \infty$: évolution temporelle des coefficients de déviation et d'aplatissement de la variable de Schvab-Zeldovich J.

5 Conclusions

Un modèle d'interaction de particules fluides destiné à simuler le mélange turbulent de particules fluides inertes ou réactives a été proposé et testé dans le cas d'une turbulence stationnaire homogène et isotrope. Les résultats obtenus par l'application de ce modèle sont en bon accord avec les évolutions issus de simulations numériques directes disponibles dans la littérature que ce soit au niveau du mélange de scalaires passifs ou réactifs. L'évaluation du comportement du modèle pour des valeurs intermédiaires du nombre de Damköhler est actuellement en cours ainsi que la détermination de la sensibilité de la qualité de la solution obtenue au nombre de macro particules fluides retenues. L'objectif est ici de considérer à terme, les possibilités d'emploi de ce modèle simple et d'implantation aisée au sein d'une approche lagrangienne de type simulation des grandes échelle ou de type moyenne de Reynolds suivant la voie proposée initialement par Pit (1993).

Références

- Curl, R.L. 1963 Dispersed phase mixing : 1. Theory and effects in simple reactors. *A.I.Ch.E. Journal*. **9**(2), 175-181.
- Dopazo, D. & O'Brien, E.E. 1976 Statistical treatment of non-isothermal chemical reactions in turbulence. *Combust. Sci. Technol.* **13**, 99-119.
- Eswaran, V. & Pope, S.B. 1988 Direct numerical simulations of the turbulent mixing of a passive scalar. *Phys. Fluids*. **31**(3), 506-520.
- Kerstein, A.R. 1991 Linear eddy modelling of turbulent transport. Part 6. Microstructure of diffusive scalar mixing fields. *J. Fluid Mech.* **213**, 361-394.
- Janicka, J., Kolbe, W. & Kollmann, W. 1979 Closure of the transport equation for the PDF of turbulent scalar fields. *Nonequil. Thermodyn.* **4**, 47-66.
- McMurtry, P.A. & Givi, P. 1989 Direct numerical simulations of mixing and reaction in a nonpremixed homogeneous turbulent flow. *Combustion and Flame*. **77**, 171-185.
- Pit, F., 1993 Modélisation du mélange pour la simulation d'écoulements réactifs turbulents : essai de modèles probabilistes eulériens-lagrangiens. Thèse de doctorat, Université de Rouen.
- Pit, F., Mory, M. & Bruel, P., en préparation, 2007.