



HAL
open science

Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité des flammes de diffusion

Memdouh Belhi

► **To cite this version:**

Memdouh Belhi. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité des flammes de diffusion. Autre [cond-mat.other]. INSA de Rouen, 2012. Français. NNT : 2012ISAM0007 . tel-00738391

HAL Id: tel-00738391

<https://theses.hal.science/tel-00738391>

Submitted on 4 Oct 2012

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.



THÈSE

Pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'INSA DE ROUEN

ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES PHYSIQUES, MATHÉMATIQUE ET DE
L'INFORMATION POUR L'INGÉNIEUR

DOMAINE DE RECHERCHE : MÉCANIQUE DES FLUIDES RÉACTIFS

Discipline : Physique
Spécialité : Énergétique

Présentée par

Memdouh BELHI

Simulation Numérique de l'Effet de Champ Electrique sur la Stabilité des Flammes de Diffusion

Soutenue le 31 Mai 2012
Devant la Commission d'Examen

JURY

Rapporteurs :

M. Vincent GIOVANGIGLI Directeur de Recherche au CNRS, École Polytechnique.
M. Nasser DARABIHA Professeur à l'École Centrale, Paris.

Examineurs :

Mme. Pascale GILLON Chargée de Recherche au CNRS, ICARE Orléans.
M. Ioan SCHNEIDER Professeur à l'Université du Havre.

Directeurs de thèse :

Mme. Pascale DOMINGO Directrice de Recherche au CNRS, CORIA Rouen.
M. Pierre VERVISCH Directeur de Recherche au CNRS, CORIA Rouen.

Dédicaces

Mes premières dédicaces s'adressent à mes parents et à mes grands parents qui m'ont donné beaucoup de soutien sur tous les plans, que j'aime beaucoup et qui avec j'espère vivre le reste d'une existence possible et heureuse.

Je ne remercierai jamais assez ma mère et mon père pour tous les sacrifices qu'ils ont fait pour moi et pour l'amour qu'ils m'ont donné. C'est ainsi grâce à eux que j'ai pu atteindre mon but. J'espère pouvoir le leur rendre un jour. Je destine mes dédicaces aussi à mes sœurs, à mon frère et à mon âme sœur. A ma famille entière, cousins et cousines, oncles et tantes.

Je remercie du fond du cœur ceux qui me soutiennent et qui sont toujours là pour me remonter le moral et me pousser à aller de l'avant, particulièrement M. S.Boudebous et M. M.S.Boulahlib ainsi que tous mes amis. Merci enfin à tous ceux amis et collègues, qui m'ont honoré de leur présence lors de la soutenance.

A ma famille et mes amis

Remerciements

Je tiens avec tous mes compliments et mes expressions d'honneur à remercier mes directeurs de thèse : Mme. Pascale Domingo et M. Pierre Vervisch pour leurs conseils et leurs orientations. Je leur exprime ma reconnaissance pour le soutien dont ils ont fait preuve tout le long de cette étude. Leur aide a été précieuse tant sur le plan scientifique que sur le plan humain. Leur enthousiasme et leur optimisme à toute épreuve m'ont permis de toujours prendre plaisir à aborder les nouveaux problèmes et leur exigence scientifique a été très formatrice et enrichissante.

Je remercie également M. Boukhlafa Mourad, directeur du CORIA, de m'avoir accueillie au sein de son laboratoire pour réaliser ce travail de thèse, pour son aide et ses excellents conseils que j'ai beaucoup appréciés.

J'exprime aussi mes remerciements à M. Vincent Giovangigli, M. Nacer Darabiha, Mme. Pascale Gillon et M. Ioan Schneider, d'avoir bien voulu accepter de participer à mon jury de thèse et du temps qui ils ont consacré à l'examen de ce manuscrit.

Enfin, je remercie tous ceux qui de loin ou de près, ont contribué à la réalisation de ce travail, particulièrement à tous les membres du CORIA qui font de ce laboratoire un endroit où il est agréable de travailler.

Table des matières

Table des matières	vii
Table des figures	xi
Liste des tableaux	xix
Nomenclature	xxi
1 Introduction	1
1.1 Contexte général	1
1.2 Applications de l'électricité à la combustion	4
1.3 Objectifs de thèse	7
1.4 Plan du manuscrit	8
2 Généralités sur la combustion et les flammes	11
2.1 Enjeux de l'étude de la combustion	12
2.1.1 Utilisations industrielles	12
2.1.2 Problématiques : Épuisement des ressources, Pollution et Sécurité	13
2.2 Stabilité des flammes	15
2.2.1 Flammes prémélangées	15
2.2.2 Flammes de diffusion	17
2.2.3 Flammes partiellement prémélangées	19
2.3 Outils de modélisation de la combustion	22
2.3.1 Équations de conservation pour les écoulements réactifs	22

Table des matières

2.3.1.1	Variables primitives	22
2.3.1.2	Représentation des équations	27
2.3.2	Modélisation de la cinétique chimique de combustion	29
2.3.2.1	Représentation de la chimie de combustion	29
2.3.2.2	Méthode de tabulation	31
2.4	Descriptif des propriétés ioniques des flammes	36
2.4.1	Formation des ions	36
2.4.2	Concentration et identité des espèces chargées	38
2.4.2.1	Ions Positifs :	38
2.4.2.2	Espèces chargées négatives :	41
2.4.3	Applications des propriétés ioniques des flammes	42
3	Notions générales sur les plasmas et les gaz ionisés	45
3.1	Définitions et phénomènes de base	46
3.1.1	Degré d'ionisation	46
3.1.2	Caractérisation thermique des plasmas	47
3.1.2.1	Plasmas thermiques	47
3.1.2.2	Plasmas non-thermiques	47
3.1.3	Méthodes de génération des plasmas	48
3.1.3.1	De manière thermique	48
3.1.3.2	De manière électrique	49
3.1.4	Caractérisation des flammes	49
3.2	Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé	50
3.2.1	Fonction de distribution et équation de Boltzmann	50
3.2.2	Force électrique : loi de Coulomb	52
3.2.3	Intensité et potentiel électriques : théorème de Gauss	53
3.2.4	Équations électro-hydrodynamiques	53
3.2.4.1	Approche classique	54
3.2.4.2	Remise en question de l'approche classique	58
3.2.5	Transport des particules chargées	61
3.3	Propriétés de transport des particules chargées dans les gaz faiblement ionisés	62
3.3.1	Mobilité électrique	62
3.3.1.1	Électrons	63
3.3.1.2	Ions	64
3.3.2	Diffusion libre	64

3.3.3	Diffusion ambipolaire	65
4	État de l'art sur l'interaction combustion et plasma froid	67
4.1	Allumage par décharges électriques	68
4.2	Traitement des émissions par champs électriques	69
4.3	Contrôle de stabilité par champs électriques	71
4.3.1	Mécanismes d'interaction	71
4.3.2	Effets de l'application d'un champ électrique sur les caractéristiques de stabilisation de la combustion	72
4.3.2.1	Études anciennes	73
4.3.2.2	Études récentes et actuelles	74
4.3.3	Conclusions	82
5	Description du modèle mathématique	83
5.1	Équations modèles	84
5.2	Propriétés de transport des espèces chargées	87
5.3	Mécanisme de la cinétique chimique	89
5.3.1	Revue des cinétiques	89
5.3.2	Cinétique des espèces neutres	91
5.3.3	Cinétique des espèces chargées	92
5.3.3.1	Processus chimique	93
5.3.3.1.1	Ions positifs	93
5.3.3.1.2	Ions négatifs	96
5.3.3.2	Calcul des termes source	100
5.3.3.3	Calcul des propriétés thermodynamiques	102
5.4	Procédure numérique	103
5.4.1	Détails sur le code de calcul SiTCom	103
5.4.2	Contributions apportées	104
6	Evaluation du modèle de la cinétique chimique	111
6.1	Description des expériences étudiées	112
6.1.1	Expériences de Goodings : Méthane/Oxygène	112
6.1.2	Expérience de Wortberg : Méthane/Air	112
6.2	Comparaison avec l'expérience	113
6.2.1	Flamme pauvre de prémélange ($\phi = 0,216$) Méthane/Oxygène	115
6.2.2	Flamme pauvre de prémélange ($\phi = 0,513$) Méthane/Air	117

Table des matières

6.3	Analyse de l'effet des anions	120
6.4	Conclusion	121
7	Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme	123
7.1	Description de la configuration étudiée	124
7.2	Comportement de la flamme en présence du champ électrique	129
7.2.1	Impact du champ électrique sur une flamme suspendue et stabilisée naturellement	129
7.2.1.1	Impact du champ électrique sur la forme globale de la flamme	130
7.2.1.2	Évolution des caractéristiques de stabilisation avec la tension appliquée	131
7.2.1.3	Évolution temporelle de la position de la pointe de flamme après l'application du champ électrique	136
7.2.2	Impact du champ électrique sur une flamme qui est soufflée	139
7.2.3	Apparition des instabilités	140
7.3	Répartition des espèces chargées	143
7.4	Répartition du champ électrique	153
7.5	Influence de la fréquence	164
7.6	Influence de la polarité	166
7.7	Dynamique de l'écoulement à la base de la flamme	168
7.8	Effet des anions	173
7.9	Effet du choix de la mobilité électrique	178
	Conclusion générale et perspectives	181
	Références bibliographiques	185
	Annexe	201
A.1	Données thermodynamiques	201
A.2	Article : Direct numerical simulation of the effect of an electric field on flame stability	205

Table des figures

1.1	Comportement d'une flamme de diffusion et ses limites de fonctionnement SANS puis AVEC assistance plasma. On remarquera l'augmentation de la vitesse de soufflage de près de 50 % [3].	5
1.2	Un champ électrique repousse une flamme de son brûleur [6].	6
1.3	Hauteur d'accrochage d'une flamme de diffusion AVANT ⁽¹⁾ et APRÈS ⁽²⁾ application du champ électrique [10].	8
2.1	Schéma du principe de la flamme 1D prémélangée.	16
2.2	Structure d'une flamme de diffusion [20].	18
2.3	Stabilisation d'une flamme de diffusion sur la lèvre d'un brûleur [20].	19
2.4	Stabilisation d'une flamme de diffusion suspendue et apparition de la flamme partiellement prémélangée [20].	19
2.5	Représentation de flamme triple, résultats de calcul DNS [26].	20
2.6	Extrait du mécanisme réactionnel GRI-MECH 3.0 [44].	32
2.7	Projection d'une flamme prémélangée turbulente (DNS) CO/H ₂ /Air en chimie complexe dans le sous-espace (Y _{CO₂} , Y _{H₂O}). (Carrée transparent) : état d'équilibre, (cercle plein) : Trajectoire flamme laminaire 1D dans les mêmes conditions, (ligne continue) : approximation linéaire de la zone froide [49].	33
3.1	Classification des plasmas que l'on peut rencontrer dans la nature et en laboratoire [105].	48
4.1	Schéma du montage expérimental d'une configuration double-électrode (circuit fermé) [155].	75

Table des figures

4.2	Schéma du montage expérimental d'une configuration mono-électrode (circuit ouvert) [154].	76
5.1	Concentration totale des : (droite) ions positifs sans et avec transport de HCO^+ , (gauche) HCO^+ , dans une flamme méthane/air 1D prémélangée pour : (a) $\phi = 0,7$, (b) $\phi = 1,0$ et (c) $\phi = 1,2$	94
5.2	Schéma du processus chimique des ions positifs.	96
5.3	Schéma du processus chimique des espèces chargées positives et négatives.	101
5.4	Isolignes des espèces chargées collectés après environ 2 (ms) de l'application de champ électrique. On voit des instabilités numériques dans le cas où la diffusion électrique des électrons est décrite avec un schéma centré qui n'apparaissent pas lorsqu'un schéma décentré est utilisé.	107
5.5	Concentration totale des : (droite) ions positifs, (centre) électrons et (gauche) ions négatifs, dans une flamme méthane/air 1D prémélangée pour : (a) $\phi = 0,7$, (b) $\phi = 1,0$ et (c) $\phi = 1,2$. Comparaison entre le schéma explicite de code et celui développé pour améliorer le pas de temps imposé par la chimie des ions (linéarisation des équations de transport des espèces chargées).	109
6.1	Profils des fractions massiques des radicaux CH et O, du terme source des ions positifs et de la température dans les conditions de l'expérience de Goodings et al.[71, 72].	114
6.2	Profils des fractions massiques des radicaux CH et O, du terme source des ions positifs et de la température dans les conditions de l'expérience de Wortberg [83].	114
6.3	Concentration des ions positifs (ligne) en comparaison avec l'expérience de Goodings et al. [72] (Symboles pleins) et la simulation de Prager et al. [76] (Symboles creux).	115
6.4	Concentration des ions négatifs (ligne) en comparaison avec l'expérience de Goodings et al. [72] (Symboles pleins) et la simulation de Prager et al. [76] (Symboles creux).	116
6.5	Concentration des ions positifs (ligne) en comparaison avec l'expérience de Wortberg et al. [83] (Symboles pleins) et la simulation de Prager et al. [172] (Symboles creux).	117
6.6	Concentration des ions négatifs (ligne) en comparaison avec la simulation de Prager et al. [172] (ligne avec symboles).	118

6.7	Concentration des électrons (ligne) en comparaison avec la simulation de Praeger et al. [172] (ligne avec symboles).	119
6.8	Évolution spatiale de la température et de la concentration ionique positive en comparaison avec l'expérience de Wortberg [83].	120
6.9	Concentration des ions positifs (ligne) en prenant en compte les anions et (ligne avec symboles) en négligeant les anions, dans les conditions des expériences de Goodings et al. [71, 72].	121
6.10	Concentration des ions positifs (ligne) en prenant en compte les anions et (ligne avec symboles) en négligeant les anions, dans les conditions de l'expérience de Wortberg et al. [83].	122
7.1	Configuration étudiée.	124
7.2	Tension alternative appliquée : Signal sinusoïdal.	126
7.3	Conditions aux limites des espèces chargées.	127
7.4	Grille de maillage utilisée.	128
7.5	Profils des vitesses axiale, u , et radiale, v , extraits à la base de flamme ($x =$ coordonnée axiale de la valeur maximale du terme source de dégagement de chaleur), obtenus avec les grilles de maillage : (symboles) 256×256 et (ligne) 512×512	129
7.6	Iso-lignes de la variable d'avancement, Y_c , AVANT (gauche) et APRÈS (droite) l'application du champ électrique, pour différentes polarités électriques.	130
7.7	Schéma définissant la hauteur de suspension et la position radiale de la base de flamme.	131
7.8	Évolution de la hauteur de suspension de flamme en fonction du voltage appliqué.	132
7.9	Évolution de la position radiale de la base de flamme en fonction du voltage appliqué.	133
7.10	Rapprochement de la base de flamme de l'axe central de l'injecteur avec l'augmentation de la tension appliquée. (ligne) : terme source de dégagement de chaleur, (ligne pointillée) : ligne stœchiométrique, (ligne mixte) : $Y_c = 0,005$	134
7.11	Variation du temps d'établissement de la hauteur de suspension, après l'application du champ électrique, avec la tension appliquée.	135
7.12	Évolutions de la vitesse moyenne du déplacement de la flamme en fonction de la tension appliquée.	136
7.13	Évolution temporelle de la hauteur de suspension de la flamme pour différentes tensions électriques.	137

Table des figures

7.14	Évolution temporelle de la hauteur de suspension (ligne continue), et du voltage appliqué (ligne pointillée), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz). (gauche) : $V_0 = \pm 500$ V, (droite) : $V_0 = \pm 250$ V.	138
7.15	Variation de la valeur seuil (minimale) de la tension nécessaire pour améliorer la stabilisation de la flamme avec la vitesse de l'écoulement coaxial.	139
7.16	Champ de la variable d'avancement et des vecteurs vitesse, à différents instants après l'application d'une tension continue positive de $V_0 = +1,25$ (kV). Apparition des instabilités.	141
7.17	Champ de la variable d'avancement et des vecteurs vitesse, à différents instants, après l'application d'une tension continue négative de $V_0 = -0,5$ (kV). Apparition des instabilités.	142
7.18	Croquis des instabilités thermo-diffusives [34]. Pour $Le < 1$ (côté gauche), la diffusion moléculaire (flèches vides) est plus importante que la diffusion thermique (flèches remplies), et le plissement du front de flamme est renforcé par le différentiel des vitesses de flamme. Pour $Le > 1$ (côté droit), une flamme stable est obtenue.	143
7.19	Champ de concentration (par/m ³) des ions positifs AVANT et APRÈS l'application du champ électrique pour différentes tensions en polarité continue (positive et négative).	145
7.20	Champ de concentration (par/m ³) des électrons AVANT et APRÈS l'application du champ électrique pour différentes tensions en polarité continue (positive et négative).	146
7.21	Champ de concentration (par/m ³) des ions négatifs AVANT et APRÈS l'application du champ électrique pour différentes tensions en polarité continue (positive et négative).	147
7.22	Instants et voltages correspondants pour lesquels les répartitions des espèces chargées (figures 7.23, 7.24 et 7.25) et du champ électrique (figures 7.33, 7.34 et 7.35) sont tracées. $V_0 = \pm 0,5$ (kV) avec $f = 1$ (kHz).	148
7.23	Répartition des espèces chargées (Par/m ³), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation (partie-1). (gauche) : cations, (centre) : électrons et (droite) : anions.	150

7.24	Répartition des espèces chargées (Par/m ³), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation (partie-2). (gauche) : cations, (centre) : électrons et (droite) : anions.	151
7.25	Répartition des espèces chargées (Par/m ³), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation (partie-3). (gauche) : cations, (centre) : électrons et (droite) : anions.	152
7.26	Variation du potentiel de flamme (ligne continue) et de la différence absolue entre le potentiel appliqué et le potentiel de flamme (ligne pointillée) en fonction du voltage appliqué.	153
7.27	Répartition du potentiel électrique (Volts) pour différentes tensions électriques en polarité continue positive et négative, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation.	154
7.28	Distribution du champ électrique (Volts/m) : composante axiale, pour différentes tensions électriques en polarité continue positive et négative, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation.	156
7.29	Distribution du champ électrique (Volts/m) : composante radiale, pour différentes tensions électriques en polarité continue positive et négative, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation.	157
7.30	Répartition de la différence entre la concentration positive et la concentration négative ($n^+ - n^-$) (Par/m ³) lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation, (gauche) : polarité continue positive $V_0=+0,5$ (kV), (droite) : polarité continue négative $V_0=-0,35$ (kV). La ligne pointillée représente l'isoline $Y_c = 0,005$	158
7.31	Champ des vecteurs force électrique en amont de la pointe de flamme. (Gauche) : $V_0= +0,5$ (kV), et (Droite) : $V_0= -0,35$ (kV).	159
7.32	Variation de la composante axiale de la force électrique à la base de flamme, lorsque la flamme atteint sa position de stabilisation, en fonction du voltage appliqué en polarité continue.	159
7.33	Répartition du potentiel électrique (Volts) lorsque la flamme atteint sa nouvelle position, après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs (voir figure 7.22).	161

Table des figures

7.34	Répartition de la différence entre les concentrations positive et négative (Par/m^3), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs (voir figure 7.22).	162
7.35	Champ des vecteurs force électrique en amont de la base de flamme lorsque celle-ci atteint sa nouvelle position de stabilisation, après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs (voir figure 7.22).	163
7.36	Évolution temporelle de la composante axiale de la force électrique extraite à la base de flamme (ligne continue), et du voltage appliqué (ligne pointillée), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz) et $V_0 = \pm 0,5$ (kV).	164
7.37	Évolution temporelle de : (ligne pointillée) voltage appliqué, et (ligne continue) potentiel de la flamme, pour différentes fréquences.	165
7.38	Évolution temporelle du potentiel de la flamme en polarité continue pour différentes tensions.	167
7.39	Variation de la vitesse axiale (U_x) et de la vitesse projetée sur la normale au front de flamme (U_n), extraites à la base de flamme, avec la tension appliquée en polarité continue, lorsque la flamme atteint sa position de stabilisation.	169
7.40	Évolution temporelle de la vitesse axiale U_x (gauche), et de la vitesse projetée sur la normale au front de flamme U_n (droite), extraites à la base de flamme, pour une tension continue positive de $+0,5$ (kV).	170
7.41	Variation de la différence ($u_p - u_d$) entre les vitesses, extraites à la base de flamme AVEC (u_d) et SANS (u_p) champ électrique à une même hauteur de flamme (4,9 fois de diamètre de l'injecteur), en fonction de la vitesse de l'écoulement coaxial. Ici, la valeur du potentiel correspond à la valeur minimale à appliquer afin d'arrêter le soufflage de la flamme pour une vitesse d'air et une hauteur données (voir section 7.2.2).	171
7.42	Évolution temporelle de la vitesse de l'écoulement projetée sur la normale au front (U_n) (ligne continue), et du voltage appliqué (ligne pointillée), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz). (gauche) : $V_0 = \pm 0,5$ (kV), (droite) : $V_0 = \pm 0,25$ (kV).	172

7.43	Comparaison de l'évolution temporelle de la vitesse de l'écoulement projetée à la normale du front (U_n) (ligne pointillée), avec celle de la hauteur d'accrochage (ligne continue), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz). (gauche) : $V_0 = \pm 0,5$ (kV), (droite) : $V_0 = \pm 0,250$ (kV).	173
7.44	Évolution de la hauteur de suspension de la flamme avec le voltage appliqué en polarité continue. (ligne continue) : en tenant compte des anions, et (ligne pointillée) : en négligeant les anions.	174
7.45	Distribution des cations (Par/m^3) dans la flamme avant l'application du champ électrique. (gauche) : en prenant compte des anions, et (droite) : en négligeant les anions.	175
7.46	Profils des ions positifs, extraits à la base de flamme à l'endroit où le dégagement de la chaleur est maximal, avant l'application du champ électrique. . . .	176
7.47	Champ de vecteurs force électrique en amont de la base de flamme pour une tension positive de $V_0 = +1$ kV, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation. (gauche) : en prenant compte des anions, et (droite) : en négligeant les anions.	177
7.48	Champ de vecteurs force électrique en amont de la base de flamme pour une tension négative de $V_0 = -0,25$ kV, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation. (gauche) : en prenant compte des anions, et (droite) : en négligeant les anions.	177

Liste des tableaux

2.1	Valeurs de concentration ionique totale maximale pour quelques flammes étudiées dans la littérature.	39
4.1	Tableau synthétisant quelques études expérimentales.	81
5.1	Valeurs de concentration ionique totale maximale, avec et sans transport de HCO^+ , dans une flamme méthane/air 1D prémélangée.	95
5.2	Mécanisme réactionnel des espèces chargées.	100
5.3	Tableau récapitulatif des espèces tabulées et transportées retenues dans le modèle chimique.	100
7.1	Évolution de la hauteur de suspension en fonction de la fréquence pour une tension alternative appliquée de $V_0 = \pm 0,5$ (kV).	164
7.2	Grandeurs extraites à partir des courbes de l'évolution temporelle du potentiel de la flamme.	166
7.3	Hauteur de suspension de la flamme pour différentes valeurs de mobilité électrique des ions.	178
7.4	Tableau récapitulatif des simulations 2D réalisées.	180
A.1	Données thermodynamiques des espèces participant dans le mécanisme réactionnel utilisé pour décrire la chimie des espèces chargées (cf. section 5.3.3).	204

Nomenclature

Symboles latins

c	Variable de progrès		
c_p	Capacité calorifique massique à pression constante	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	
c_v	Capacité calorifique massique à volume constant	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	
D	Coefficient de diffusion moléculaire	$m^2 \cdot s^{-1}$	
e	Charge électrique élémentaire	Coulomb	$(1,602 \times 10^{-19})$
E	Intensité électrique	Volt $\cdot m^{-1}$	
E/n	Intensité du champ électrique réduit	Volt $\cdot m^2$	
E_t	Énergie totale massique non chimique	$J \cdot kg^{-1}$	
F	Force électrique volumique	Newton $\cdot m^{-3}$	
K	Constante de Boltzmann	$J \cdot K^{-1}$	$(1,381 \times 10^{-23})$
k_f	Taux de réaction direct	$m^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$	
k_b	Taux de réaction inverse	$m^3 \cdot mol^{-1} \cdot s^{-1}$	
k_c	Constante d'équilibre de réaction		
Le	Nombre de Lewis		
m	Masse moléculaire	kg	
n	Concentration (densité) moléculaire	m^{-3}	
p	Pression statique	Pascal	
Pr	Nombre de Prandtl		
q	Charge électrique	Coulomb	
R	Constante universelle des gaz parfaits	$J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	$(8,314)$
Sc	Nombre de Schmidt		

Nomenclature

S_L	Vitesse de flamme laminaire	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire à la stœchiométrie	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
Re	Nombre de Reynolds	
t	Temps	s
T	Température	K
u	Vitesse axiale	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
v	Vitesse radiale	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
V	Potentiel électrique	Volt
V_0	Potentiel électrique appliqué	Volt
W	Masse molaire	$\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$
x	Coordonnée axiale	m
$[X]$	Concentration molaire	$\text{mol}\cdot\text{m}^{-3}$
y	Coordonnée radiale	m
Y	Fraction massique	
Y_c	Variable d'avancement	
Z	Fraction de mélange	

Symboles grecques

κ	Mobilité électrique	$\text{m}^2\cdot\text{Volt}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
λ	Conductivité thermique	$\text{Watt}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
ρ	Masse volumique	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
ϵ_0	Permittivité du vide	$\text{Farad}\cdot\text{m}^{-1}$ (8,854 $\times 10^{-12}$)
ϕ	Richesse de mélange	
$\dot{\omega}$	Terme source chimique	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
$\dot{\omega}_T$	Terme source d'énergie	$\text{J}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$

Autres Symboles

\aleph	Nombre d'Avogadro	mol^{-1}	(6,022 $\times 10^{23}$)
----------	-------------------	-------------------	---------------------------

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Contexte général	1
1.2	Applications de l'électricité à la combustion	4
1.3	Objectifs de thèse	7
1.4	Plan du manuscrit	8

1.1 Contexte général

Pointée du doigt pour sa contribution à la pollution atmosphérique et au réchauffement planétaire, la combustion reste néanmoins un mode de production d'énergie incontournable qu'elle soit à base de produits pétroliers, issus de la biomasse¹ ou encore de déchets. Elle est utilisée dans de nombreux systèmes aussi bien pour produire de la chaleur (chaudières ou fours domestiques et industriels) et de l'électricité (centrales thermiques) que pour le transport (automobile et aéronautique) ou encore l'incinération de déchets. La croissance de la demande énergétique et l'épuisement des ressources fossiles d'une part, et d'autre part les problèmes de pollution, impliquent la diminution de la consommation et la réduction des émissions polluantes de pair avec l'amélioration des rendements de combustion. Il est donc essentiel de continuer à développer des techniques permettant d'optimiser l'efficacité et l'impact sur l'environnement des systèmes de production d'énergie par combustion.

Le régime de combustion pauvre en carburant permet de répondre à ces deux critères avec pour inconvénients majeurs de produire des zones de réactions instables et d'être plus difficile à allumer.

1. Le terme de biomasse désigne l'ensemble des matières organiques d'origine végétale, animale ou fongique pouvant devenir source d'énergie par combustion.

Différentes méthodes d'aide à la stabilisation de la combustion sont donc utilisées, en particulier pour assister la combustion pauvre. La méthode la plus répandue est la modification de la géométrie de brûleur ou l'ajout d'un dispositif spécial qui change l'écoulement. Ces modifications ont pour but d'améliorer le mélange et le transfert de chaleur. Cela peut être réalisé, par exemple, par un écoulement animé d'un mouvement hélicoïdal (SWIRL), ou par un obstacle placé dans l'écoulement créant un blocage important ainsi qu'un effet de culot afin de servir de stabilisateur ou d'accroche-flamme. De telles méthodes sont souvent utilisées dans les brûleurs industriels et les chambres de combustion pour assurer une inflammation continue et maintenir la flamme dans son domaine de stabilité. Néanmoins, elles présentent des limites ; elles ne sont pas flexibles et ne sont donc pas optimisées pour tous les régimes de combustion. Aussi, elles nécessitent une modification structurelle du système de combustion, ce qui est onéreux et n'est pas toujours possible technologiquement. Une autre solution technique est l'ajout ponctuel d'énergie dans la flamme, notamment à sa base. La technique la plus courante est l'utilisation d'une flamme auxiliaire pilote permettant d'étendre le domaine de stabilité de combustion d'un brûleur par un apport local de chaleur et de radicaux en évitant les fortes perturbations aérodynamiques d'un accroche-flamme solide. Toutefois, le surcoût énergétique de ces techniques est à prendre en considération dans la facture globale du système. Un autre procédé est l'utilisation de carburants alternatifs (gaz naturel, biomasse) ou l'oxy-combustion (combustion à l'oxygène) qui permettent de diminuer les émissions polluantes de manière importante et peuvent ainsi améliorer les limites de stabilité. Cependant, le surcoût engendré par l'utilisation de ces produits est important et leur utilisation reste limitée à certaines applications.

Également, diverses méthodes pour faciliter l'allumage et accélérer l'inflammation sont considérées. Traditionnellement, l'allumage est effectué à l'aide d'une étincelle de bougie ; l'étincelle crée localement un noyau de gaz très chaud, riche en radicaux libres, qui se développe ensuite par convection pour former un noyau de flamme. Les principaux défauts de l'allumage par bougie sont bien connus : l'allumage du mélange reste très localisé, le rendement énergétique est très faible et les électrodes de la bougie s'érodent et s'encrassent. L'étincelle peut ainsi être créée par de différents types laser (ArF^2 , KrF^3 , Nd-YAG^4). Néanmoins, ces méthodes laser ont aussi quelques inconvénients qui sont principalement liés à la complexité de l'équipement du laser, à la nécessité d'assurer une transparence optique du système tout en injectant un rayonnement laser et à l'impossibilité de fournir une grande uniformité de l'initiation d'allumage dans les grands volumes de combustible. Une autre méthode dite d'auto-inflammation est largement

2. Laser à fluorure d'argon
3. Laser à fluorure de krypton
4. Laser à grenat d'yttrium-aluminium dopé au néodyme

utilisée dans les moteurs Diesel et les turboréacteurs. Dans ce genre d'allumage, la combustion est déclenchée spontanément par l'élévation de la température due à la compression de l'air. L'inconvénient majeur de cette technique est les restrictions importantes sur la géométrie du système et donc elle ne peut pas être utilisée pour toutes les applications.

Une nouvelle technologie pour assister la combustion qui connaît un véritable essor est l'utilisation de systèmes de contrôle actif comme le plasma ou l'excitation acoustique⁵. En effet, depuis plusieurs années, de nombreuses études sont menées pour la compréhension et l'utilisation de plasmas froids pour assister la combustion. Néanmoins, ce domaine est encore méconnu et les mécanismes agissants ne sont pas formellement identifiés.

En physique, le terme plasma, appelé aussi «quatrième état de la matière», décrit une phase de la matière dans laquelle on trouve, à côté des particules neutres (atomes, molécules, radicaux), des ions (anions⁶, cations⁷) et des électrons libres. Ces espèces chargées se forment lorsque l'énergie de milieu devient très élevée. Selon l'amplitude de cette énergie, les plasmas sont couramment différenciés en plasmas froids ou plasmas chauds (cf. chapitre 3). Ces derniers n'étant pas le sujet de cette thèse, ils ne seront que peu évoqués. Les plasmas froids se caractérisent par une énergie du système relativement faible. Donc, contrairement aux plasmas chauds qui demandent une énergie importante pour leur création, les plasmas froids offrent une réserve d'énergie tout en restant peu coûteux en énergie. C'est cet aspect qui incite à les utiliser dans de nombreuses applications telles que l'aide à la combustion.

L'application des plasmas à la combustion se fait généralement d'une manière électrique en imposant un potentiel électrique entre deux électrodes. Le type de plasma généré dépend en grande partie de l'intensité du champ électrique appliqué. Ainsi, selon cette intensité, comme nous verrons dans le chapitre 4, les études dans le domaine de la combustion assistée par plasma froid sont généralement divisées en deux parties : une première partie concernant les champs électriques relativement faibles et une deuxième partie s'intéressant aux configurations où la tension électrique est suffisante pour générer des décharges électriques. Dans la première catégorie, on parle plutôt de champs électriques appliquées aux flammes ; il n'y a donc pas de création d'espèces chargées, mais seulement le plasma produit naturellement dans les flammes, qui est sensible aux différences de potentiel électrique, est utilisé. En revanche, dans la deuxième catégorie, en plus de celles déjà présentes dans le milieu, le fort champ électrique appliqué crée de nouvelles espèces chargées.

5. Contrôle de combustion par champ (ondes) acoustique.

6. Une espèce chimique qui, ayant gagné un ou plusieurs électron(s), est électriquement chargée négativement.

7. Une espèce chimique qui, ayant cédé un ou plusieurs électron(s), est électriquement chargée positivement.

La combustion assistée par champs ou décharges électriques est un domaine en pleine émergence dans un contexte de recherche de l'amélioration des performances tant du point de vue efficacité énergétique que contrôle de la pollution. Ce domaine prometteur est toutefois très complexe et nécessite des études importantes. C'est dans ce cadre que nous nous sommes intéressés au potentiel des champs électriques relativement faibles à assister la stabilisation des flammes.

1.2 Applications de l'électricité à la combustion

Les scientifiques savent depuis deux cents ans environ que l'électricité peut affecter les flammes. Le phénomène remonte à 1814 lorsque le savant W.T. Brande⁸ a publié un mémoire intéressant [1], dans lequel il a cherché d'expliquer les phénomènes curieux que représentent les flammes en présence de champs électriques. Brande a découvert que le comportement de la flamme est sensiblement changé lorsqu'elle est placée entre deux électrodes. On a constaté que l'influence du champ électrique sur le transfert de chaleur et de masse a été si forte que la flamme et les suies sont déplacées vers l'électrode chargée négativement. Ainsi, Brande est le premier à avoir montré l'effet du champ électrique sur la vitesse de propagation de la flamme. Par la suite, les effets observés par Brande ont été confirmés et il a été constaté que le champ électrique peut ainsi déformer, pivoter, faire rayonner différemment et même aspirer les flammes.

L'ampleur de ces effets a encouragé les chercheurs d'aujourd'hui à réfléchir à la manière d'utiliser les champs et les décharges électriques pour assister la combustion dans toutes ses étapes. Le progrès récent dans la recherche et le développement des technologies basées sur les plasmas, pour l'amélioration de l'allumage et de la combustion dans les systèmes de propulsion et génération d'énergie, a même conduit à la formation d'une nouvelle branche de la science connue sous le nom de : « Combustion assistée par plasma ». Une conférence annuelle nommée « International Workshop and Exhibition on Plasma Assisted Combustion » et un numéro annuel spécial au titre « IEEE Transactions on Plasma Science » sont consacrés principalement aux nouvelles recherches et applications de ce thème d'actualité.

Les recherches dans le domaine de la combustion soutenue par électricité sont diverses et pourraient être divisées en plusieurs groupes, y compris les suivants :

Allumage : L'inflammation du carburant est un problème important dans les recherches de combustion tant du point de vue fondamental qu'appliqué. En dépit du fait que le principe d'al-

8. William Thomas Brande (1er janvier 1788-1er février 1866) est un chimiste britannique né à Londres.

lumage thermique par étincelle est connu depuis longtemps et utilisé largement dans l'industrie, il y a différentes applications où l'utilisation des systèmes de plasma froid non-thermique peut avoir des bénéfices significatifs. Les résultats obtenus par de nombreuses études, au cours des dix à quinze dernières années, confirment définitivement que les décharges plasma initialisent des chaînes chimiques dans les gaz [2]. C'est ainsi que l'utilisation des décharges impulsives nanosecondes répétitives à la place des étincelles traditionnelles permet de réduire le délai d'allumage et d'accélérer la combustion. De plus, compte tenu de leur faible coût énergétique, ces décharges électriques peuvent permettre d'augmenter le volume de la zone d'allumage et de s'affranchir ainsi des problèmes d'inhomogénéité locale. Ce nouveau type d'allumage se présente donc comme une perspective énergétique importante et peut devenir une technique très prometteuse pour un certain nombre d'applications industrielles.

Stabilisation des flammes : La modification du comportement de la flamme, notamment l'amélioration de sa stabilité, est une application directe de la combustion soutenue par plasma. Des études sur ce thème ont montré que de simples champs ou décharges électriques ont permis l'existence d'une flamme à des régimes pour lesquels elle serait normalement soufflée et même de la stabiliser au-delà des conditions d'extinction du brûleur (fig.1.1). Dans ces conditions, la flamme n'existerait pas sans l'utilisation du plasma. Cette amélioration de la stabilité est généralement obtenue pour un apport énergétique très faible d'un ordre inférieur à quelques pourcents de la puissance de la flamme. L'utilisation de l'électricité pour stabiliser les flammes présente donc deux avantages : une grande flexibilité contrairement aux méthodes de stabilisation classiques et un surcoût énergétique faible.



Figure 1.1 – Comportement d'une flamme de diffusion et ses limites de fonctionnement SANS puis AVEC assistance plasma. On remarquera l'augmentation de la vitesse de soufflage de près de 50 % [3].

Réduire les émissions polluantes : D'après ce qu'on a vu, l'intérêt du plasma froid apparaît naturellement pour le traitement des émissions polluantes de la combustion. En effet, la stabilisation des flammes et la réduction de la pollution sont deux sujets qui peuvent être interdépendants. Par exemple, dans le cas des flammes pauvres, le plasma peut stabiliser la flamme ce qui présente naturellement une amélioration du rendement de combustion concernant sa pollution. Certains articles se sont intéressés directement au problème du traitement des résidus de la combustion par l'application des champs ou des décharges électriques [4, 5]. Plusieurs de ces études ont démontré l'efficacité des plasmas pour diminuer la pollution liée à la combustion.

Contrôle des incendies : Une découverte qui pourrait supporter un nouveau genre de dispositifs contre les incendies vient d'émerger. Elle concerne des systèmes de gicleurs qui éteignent les incendies non pas avec de l'eau, mais avec des tirs de courant électrique sans trempage ni endommagement irréparable du contenu de la structure incendiée (maison, entreprise, etc...). Une toute récente recherche [6] a montré que, en appliquant d'importants champs électriques, les flammes peuvent être supprimées très rapidement. De telle technique présente trois avantages : économique, environnemental et sécuritaire. En effet, elle permet l'extinction des incendies à distance sans fournir de matériaux anti-incendie qui pourraient nuire à l'environnement. Néanmoins, ce secteur de recherche novateur et très enthousiasmant reste relativement inexploré.

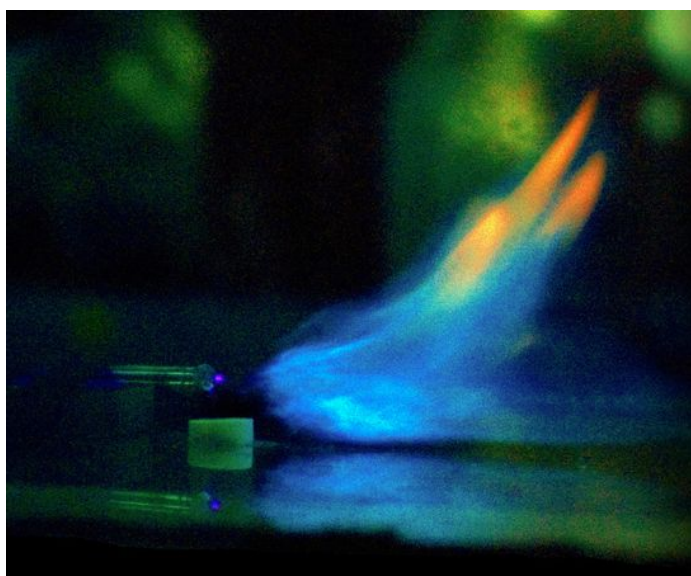


Figure 1.2 – Un champ électrique repousse une flamme de son brûleur [6].

A l'heure actuelle, des technologies avancées basées sur les plasmas, développées principalement pour : améliorer la fiabilité d'allumage, éviter les instabilités des flammes et réduire les émissions et les suies, se trouvent dans un large champ d'applications incluant les systèmes de propulsion aérospatiale, les unités de production de l'électricité, les chaudières, les fourneaux, les incinérateurs, les radiateurs, les séchoirs, etc... . Un aperçu de ces technologies et leur classification est proposé dans le document [7].

1.3 Objectifs de thèse

La communauté scientifique s'accorde aujourd'hui pour reconnaître l'efficacité des champs et décharges électriques pour soutenir la combustion dans toutes ses étapes. Une revue des études sur ce thème et des différents mécanismes mis en jeu pour expliquer les effets observés sera présentée dans le chapitre 4. Nous verrons que plusieurs questions de nature différentes restent sans réponses définitives et un certain nombre d'éclaircissements doivent encore être apportés à ce domaine de recherche. En effet, la combustion soutenue par plasma froid est une nouvelle branche de la science basée sur l'interaction d'un certain nombre de phénomènes physiques ; et afin de donner une description adéquate de celle-ci, il est nécessaire de combiner une connaissance détaillée de la physique des décharges dans les gaz, de l'hydrodynamique et de la cinétique chimique. Ces phénomènes sont complexes et n'ont pas encore été complètement compris. À ce titre, des expériences sont absolument nécessaires pour acquérir une compréhension profonde de la physique de l'allumage ou l'amélioration de la combustion en se basant sur le plasma. Des simulations numériques permettant de décrire le processus avec une analyse critique sont également incontournables.

La modélisation numérique de la combustion permet d'abord de confronter les résultats numériques aux essais et d'envisager par la suite de réduire le nombre d'essais sur banc. Elle présente également un fort potentiel pour la compréhension des phénomènes physiques. Il apparaît donc intéressant de s'appuyer sur cet outil pour développer la combustion assistée par plasma. C'est dans ce cadre que nous nous sommes intéressés à la simulation numérique de l'effet du champ électrique sur la stabilité des flammes de diffusion.

L'objectif de cette thèse est donc de développer des modèles, à intégrer dans des codes de simulations numériques, permettant de décrire l'interaction entre de faibles champs électriques et la combustion afin de mieux comprendre les mécanismes en jeu, ainsi que de fournir un outil numérique qui prédit la réponse des flammes aux champs électriques.

Une situation principale est étudiée pendant la thèse ; elle concerne la stabilisation de flammes de diffusion par application d'un champ électrique continu ou alternatif. En fait, lorsqu'un champ électrique est appliqué à une flamme, les espèces chargées présentes naturellement dans la flamme subissent une force. Cette force de volume électrique modifie l'écoulement dans la région du front de flamme [8]. Dans le cas d'une flamme décrochée, l'application d'un champ électrique peut donc contribuer à une meilleure stabilisation de la flamme. Par exemple, une flamme décrochée non-prémélangée a tendance à se stabiliser le long d'une surface à la stoechiométrie, dans une zone de basses vitesses où la vitesse locale est de l'ordre de la vitesse de propagation d'une flamme de prémélange à la stoechiométrie [9]. Les changements de vitesse locale induits par la présence de la force de volume électrique peuvent donc expliquer les variations de hauteur de stabilisation observées expérimentalement (fig. 1.3). Un des principaux objectifs de cette thèse est donc de vérifier cette dernière hypothèse.

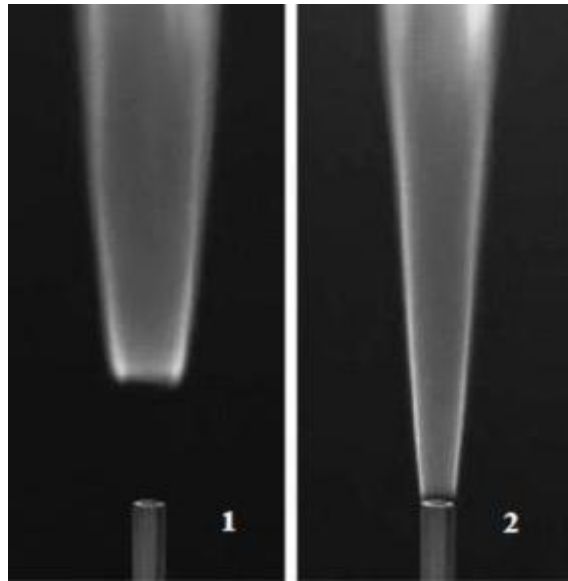


Figure 1.3 – Hauteur d'accrochage d'une flamme de diffusion AVANT ⁽¹⁾ et APRÈS ⁽²⁾ application du champ électrique [10].

1.4 Plan du manuscrit

Le présent travail est consacré principalement à la détermination des effets de l'application de champ électrique sur les flammes laminaires suspendues, et à la compréhension des mécanismes d'interaction. L'attention est portée sur la capacité du champ électrique à améliorer la stabilité des flammes. Il est structuré de la manière suivante :

Faisant suite à la présente introduction au contenu de ce mémoire, le deuxième chapitre présente quelques facettes du thème de la combustion ; on s'intéresse notamment aux outils de modélisation utilisés pour étudier les milieux réactifs. L'interaction entre le champ électrique et les espèces chargées produites dans les flammes présente l'axe principal de cette étude. En conséquence, une attention particulière est portée sur les caractéristiques ioniques des flammes à la fin de ce chapitre.

Le troisième chapitre aborde quelques notions de base sur les gaz ionisés. Il expose également quelques approches théoriques qui décrivent la dynamique des gaz faiblement ionisés en présence d'un champ électrique. L'objectif est de mettre en avant les équations régissant le comportement des flammes sous l'influence des courants électriques externes.

Le chapitre suivant représente une revue bibliographique non-exhaustive des travaux existants sur l'interaction combustion et électricité. L'attention est mise sur les études examinant la stabilisation des flammes par application de champs électriques relativement faibles.

La formulation mathématique établie dans cette thèse pour décrire l'interaction de la combustion avec le champ électrique est détaillée dans le cinquième chapitre. Elle inclut les différents aspects du phénomène étudié : mécanique des fluides, chimie et électricité. La procédure numérique, suivie pour résoudre le système d'équations électrodynamiques, est présentée également dans ce même chapitre.

Le sixième chapitre est dédié à l'évaluation du mécanisme réactionnel des espèces chargées développé dans cette étude et utilisé dans les simulations. Deux flammes monodimensionnelles de prémélange sont donc calculées et confrontées aux mesures expérimentales disponibles.

Le dernier chapitre expose notre étude de stabilisation de la flamme suspendue par champ électrique continu ou alternatif. Les principaux résultats obtenus par les nombreuses simulations ainsi que leurs interprétations sont alors présentées.

Ce document se termine par une conclusion générale qui reprend les objectifs de ce travail, les principaux résultats obtenus ainsi que les perspectives envisagées et jugées utiles pour la poursuite de cette étude.

Enfin, un article [11], publié au journal : « Combustion and Flame », est annexé à ce document (voir annexe A.2).

Chapitre 2

Généralités sur la combustion et les flammes

Sommaire

2.1	Enjeux de l'étude de la combustion	12
2.1.1	Utilisations industrielles	12
2.1.2	Problématiques : Épuisement des ressources, Pollution et Sécurité	13
2.2	Stabilité des flammes	15
2.2.1	Flammes prémélangées	15
2.2.2	Flammes de diffusion	17
2.2.3	Flammes partiellement prémélangées	19
2.3	Outils de modélisation de la combustion	22
2.3.1	Équations de conservation pour les écoulements réactifs	22
2.3.2	Modélisation de la cinétique chimique de combustion	29
2.4	Descriptif des propriétés ioniques des flammes	36
2.4.1	Formation des ions	36
2.4.2	Concentration et identité des espèces chargées	38
2.4.3	Applications des propriétés ioniques des flammes	42

Dans ce chapitre, nous présentons quelques points sur la combustion qui sont jugés utiles à la compréhension de ce travail de thèse. Nous aborderons tout d'abord le thème de la combustion par un aperçu de ses applications, avant d'en résumer ses problématiques. Ensuite, on s'intéresse au problème qui est à l'origine de cette étude, c'est à dire la stabilité des flammes ; nous verrons que nous avons divers régimes de flammes qui seront récapitulés dans la seconde partie de ce chapitre. Dans la troisième section, à cause de l'aspect numérique de la présente étude, on introduit un ensemble d'outils de modélisation : équations, hypothèses, stratégies de calcul, etc.... La modélisation de l'interaction entre champs électriques et ions des flammes étant le thème de ce mémoire, un descriptif des propriétés ioniques des flammes clôture ce premier chapitre.

2.1 Enjeux de l'étude de la combustion

La combustion est un phénomène extrêmement répandu dans la nature et l'industrie. Depuis son existence sur Terre, l'homme n'a cessé d'utiliser la combustion. Il utilisa le feu pour se nourrir, se réchauffer et pour se défendre. Aujourd'hui, la vie industrielle est basée en grande partie sur la combustion et les flammes. Mais avant de présenter ses applications, il est important de donner la signification de la combustion. Une question qui a été continuellement débattue sans une évidente conclusion. Une définition courante la présente comme une réaction chimique exothermique, qui se matérialise par des flammes, entre l'oxygène de l'air et certaines substances (gaz, liquide ou solide) dites combustibles. La combustion ne peut se produire que lorsque l'on réunit trois éléments : un combustible, un comburant (oxygène) et une énergie d'activation (certaine température). On appelle ceci le triangle du feu.

La combustion et les flammes ont longtemps posé des problèmes de compréhension et de maîtrise. Ces problèmes viennent du fait que plusieurs aspects physiques et chimiques interviennent simultanément et d'une façon couplée. Pour une compréhension plus fine de ces aspects, on pourra se référer à certains livres de référence [12-14].

2.1.1 Utilisations industrielles

La combustion reste encore aujourd'hui le principal moyen de conversion de l'énergie. Le nombre élevé des applications l'atteste. Les études les plus récentes font état de la poursuite d'un recours majoritaire à la combustion au moins jusqu'à l'horizon 2020, notamment dans les secteurs d'automobile et du transport aérien.

L'industrie utilise la combustion et les flammes de nombreuses et différentes manières :

Les moteurs : Ils représentent la plus grande catégorie de dispositifs de combustion. Ils sont généralement utilisés dans le secteur de transport pour propulser les divers véhicules : avions, fusées, bateau et automobiles grâce à l'énergie thermique que la combustion dégage. Différents types de moteurs existent ; les exemples les plus courants sont les moteurs à allumage commandé, les moteurs Diesel, les turboréacteurs et les moteurs-fusée.

Les brûleurs : Ils sont utilisés dans la plupart des applications de la combustion destinées à produire de l'énergie sous forme de chaleur ou d'électricité. Cette énergie est essentiellement générée dans des installations comme les turbines à gaz, les centrales thermiques, les fours ou encore les chaudières. Les brûleurs peuvent également avoir comme rôle de détruire (incinération des déchets), transformer (sidérurgie, métallurgie, ...) ou fabriquer des produits (verre, ciment,

papier, nylon, ...). On peut distinguer les brûleurs à gaz, les brûleurs à fuel-oil (liquide) et les brûleurs qui utilisent comme combustible le charbon (solide).

Les incendies et les explosions : Ils constituent, enfin, la dernière catégorie de situations industrielles ou naturelles dans laquelle la combustion joue un rôle prépondérant. Ces phénomènes peuvent être mis en relation directe avec les applications de la combustion citées précédemment. La compréhension de tels événements peut alors servir pour les contrôler en prévoyant leur déroulement possible et donc estimer les risques associés.

Pour une description plus détaillée des utilisations de la combustion dans l'activité humaine, le lecteur pourra se référer à l'ouvrage [13].

2.1.2 Problématiques : Épuisement des ressources, Pollution et Sécurité

L'aperçu précédent des utilisations de la combustion montre l'intérêt très large du phénomène de la combustion et des flammes pour l'industrie aussi bien que pour la société. Le contexte actuel de cet intérêt est défini par deux règles contradictoires qui régissent nos sociétés. D'une part, l'accroissement de la demande mondiale en énergie qui provient à 80% des combustibles fossiles (pétrole : 35%, charbon : 24%, gaz : 21%). Et d'autre part, le souci écologique exprimé par la certitude d'un épuisement des ressources fossiles ainsi que la dégradation irréversible de l'environnement par la pollution.

En effet, « au rythme actuel d'exploitation, la situation des réserves de pétrole et de gaz naturel est extrêmement préoccupante ; quant au charbon, les réserves sont immenses dans l'ensemble du monde mais les problèmes de pollution locale et globale et les difficultés d'exploitation limitent son utilisation à très grande échelle [15] ». Ainsi, certaines des substances chimiques libérées par la combustion sont directement dangereuses pour l'homme (toxiques ou asphyxiantes) ; d'autres risquent de modifier la composition de l'atmosphère et donc de mettre en péril la vie sur Terre. Par exemple, l'influence des rejets de gaz à effet de serre, résultant de la combustion des carburants fossiles, sur le réchauffement climatique dont les conséquences peuvent être dramatiques est quasi-unanimement reconnue. Un autre type de danger est les incendies et les explosions qui peuvent provoquer de graves dégâts humains, matériels ou encore environnementaux.

C'est au sein de ces enjeux que se situe l'étude et les recherches sur la combustion, avec pour objectif principal d'en comprendre les aspects physiques et chimiques afin d'améliorer les rendements et maîtriser les risques. Pour relever ces défis énergétiques et environnementaux

auxquels nos sociétés sont confrontées, les autorités ont imposé de réguler les émissions de polluants via des réglementations et des normes. Celles-ci s'appliquent en général pour un type particulier d'industrie ou de famille de produits. Les dispositifs en vigueur pour certains secteurs sont présentés en détail dans les thèses de Godel [16] et de Naudin [17].

Pour répondre aux objectifs et normes espérés, les chercheurs et développeurs du domaine ont mis en œuvre plusieurs outils qui se déclinent en trois catégories majeures. La première catégorie concerne les analyses théoriques et analytiques qui permettent de décrire certaines propriétés fondamentales, de poser des hypothèses et d'établir des lois asymptotiques. La vérification de ces hypothèses et lois théoriques ainsi que la compréhension simplifiée des propriétés fondamentales entraînent deux autres catégories d'outils, qui sont l'expérience et la modélisation numérique. Ces deux derniers outils sont en effet aujourd'hui une source importante d'innovation dans le domaine de la recherche en combustion.

L'étude des systèmes de combustion est une des premières disciplines de la science. Depuis l'antiquité et jusqu'à maintenant, la combustion est considérée comme l'un des principaux facteurs qui permet le développement de l'activité humaine. Donc, son étude et sa compréhension ont constitué une préoccupation importante pour les scientifiques et les chercheurs de toutes les époques. Tous les secteurs en ont bénéficié comme le transport, la production de l'énergie ou encore la sécurité (maîtrise des incendies). À l'heure actuelle, les recherches en combustion se concentrent essentiellement sur les thématiques suivantes :

- Étudier les caractéristiques des flammes dans les écoulements turbulents et laminaires : allumage, extinction, propagation, structure, instabilités, émissions, etc ... ;
- Progrès des méthodes de diagnostic et de calcul dans la combustion ;
- Développement et validation des cinétiques chimiques adaptées au phénomène de la combustion ;
- Investigations des technologies des systèmes de combustion : moteurs, turbines, combustion catalytique, combustion sous les conditions critiques, etc ... ;
- Compréhension et maîtrise des phénomènes compliqués : incendies, explosions, détonations, etc ... ;
- Exploration des nouveaux concepts : interaction avec plasma, excitation acoustique, etc

La présente étude s'inscrit dans l'axe des nouveaux concepts utilisés pour améliorer le rendement de la combustion. Elle s'intéresse en particulier à l'amélioration de la stabilité des flammes par l'application de champ électrique. En effet, les instabilités de combustion sont un problème délicat et fréquent dans le développement des moteurs-fusée, des turbines aéronautiques et terrestres et dans plusieurs systèmes industriels. Ces instabilités se manifestent par de fortes oscillations des différents paramètres de l'écoulement qui peuvent considérablement perturber le fonctionnement du système.

2.2 Stabilité des flammes

Pour diminuer les polluants nocifs et les imbrûlés issus de la combustion, on utilise un excédent d'air. Dans ce régime de combustion dit pauvre, on consomme théoriquement tout le combustible, ce qui donne une combustion complète et moins d'imbrûlés. Ce mode de combustion favorise cependant l'apparition des instabilités, par exemple : « le décrochage », « le soufflage » et même « l'extinction » de la flamme.

« En pratique, l'initiation des flammes fait appel à un apport d'énergie extérieur qui provient, par exemple, d'une petite flamme annexe (allumette) ou de l'étincelle issue d'une bougie d'allumage. Mais cet apport n'intervient en général que pendant un temps limité. Ensuite, la flamme doit rester stable sans source extérieure d'énergie, sous peine de s'éteindre [18] ». Une flamme instable ou qui s'éteint en plein processus non seulement ne remplit pas sa mission, mais peut conduire à de graves problèmes de sécurité (explosions et incendies) si les écoulements de gaz ne sont pas arrêtés. L'analyse et l'identification des mécanismes responsables de la stabilisation des flammes sont donc nécessaires.

On entend par flamme stable la présence d'une zone de réaction plus ou moins fixe dans l'espace en dépit de petites perturbations de l'écoulement alimentant la combustion. Il s'agit d'un phénomène complexe qui dépend de la dynamique de l'écoulement et de la qualité du mélange des réactifs. Les scénarios régissant la stabilisation des flammes ne sont pas encore bien identifiés à ce jour. Les principaux mécanismes de stabilisation des flammes suggérés, dans les différents régimes de combustion : prémélangé, de diffusion et partiellement prémélangé, vont maintenant être brièvement décrits.

2.2.1 Flammes prémélangées

Dans le cas de la flamme prémélangée, comme le montre la figure 2.1, carburant et oxydant sont mélangés initialement avant la zone de réaction et la combustion a lieu lorsque ces réactifs atteignent une température suffisante dite température d'auto-inflammation.

Ces flammes ont la capacité de se propager dans l'espace des gaz frais. La vitesse de flamme laminaire (notée S_L) caractérise ce déplacement. En effet, la zone de flamme en cours de combustion fournit de la chaleur aux gaz frais voisins permettant ainsi leur inflammation. L'étude de ces caractéristiques propagatives du front de flamme présente un intérêt particulier dans le cadre d'une étude de stabilité, puisque l'aptitude de la flamme à se propager avec une vitesse plus ou moins importante est un des mécanismes mis en jeu dans le processus de stabilisation.

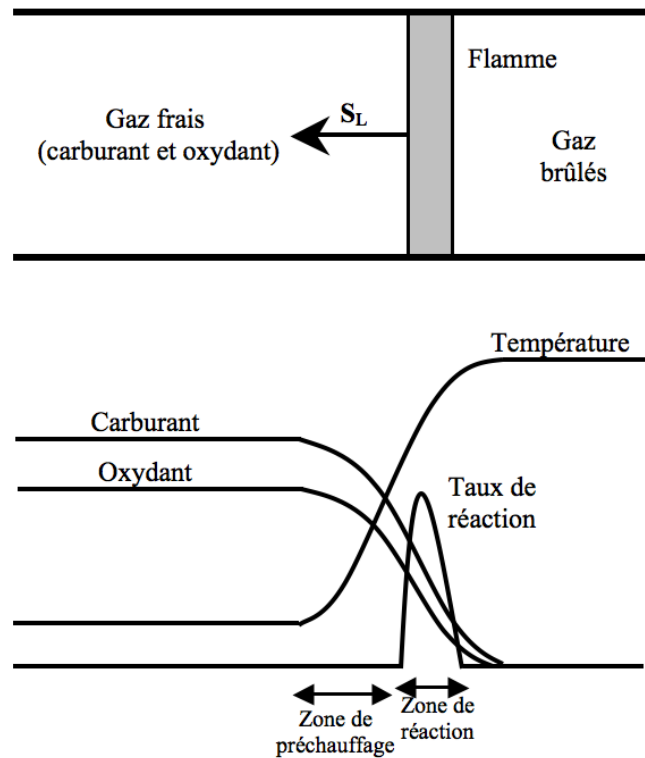


Figure 2.1 – Schéma du principe de la flamme 1D prémélangée.

Le mode prémélangé est souvent utilisé en régime pauvre (le carburant est en quantité inférieure aux conditions stœchiométriques) permettant de réduire la production d'oxyde d'azote. En contrepartie, les flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser (instabilités). De plus, dans un contexte industriel, la question du stockage d'un mélange air/carburant dans la gamme de flammabilité, qui est essentielle pour ce régime de combustion, n'est pas envisageable.

Pour décrire les flammes prémélangées, on fait souvent appel à la variable de progrès (notée c). Celle-ci peut être définie à l'aide de grandeurs comme la température, T , ou bien certaines fractions massiques d'espèces, Y . En utilisant les indices u et b pour caractériser, respectivement, les zones de gaz frais et de gaz brûlés, on peut écrire :

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u}$$

On pourra ainsi définir une variable d'avancement, Y_c , qui sera abordée dans la suite du manuscrit dans un contexte de chimie tabulée.

Un autre paramètre incontournable pour décrire une flamme prémélangée est sa richesse ; elle présente une grandeur fondamentale influant notamment sur les vitesses et les épaisseurs

caractéristiques des flammes. La richesse d'une flamme est égale à l'unité dans un mélange stœchiométrique, supérieure à 1 en mélange riche en carburant et inférieure à 1 dans les flammes dites pauvres. Elle est définie ainsi :

$$\phi = \frac{sY_{F,0}}{Y_{O,0}}$$

où $Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ sont les fractions massiques de fuel et d'oxydant initiales, tandis que s est le rapport de mélange stœchiométrique caractérisant la réaction globale de combustion : $\nu_F F + \nu_O O \mapsto$ Produits ; il est défini comme suit :

$$s = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F}$$

avec ν_F et ν_O les coefficients molaires stœchiométriques, W_F et W_O les masses molaires.

Comme dit précédemment, les caractéristiques propagatives des flammes prémélangées ont un intérêt essentiel pour étudier le mécanisme de stabilisation. En effet, on parle de stabilisation de flamme en milieu prémélangé, lorsque le flux de gaz frais s'écoulant dans une direction opposée à la propagation de l'onde de combustion a une vitesse égale à la vitesse de propagation de la flamme [19]. La flamme devient alors stationnaire relativement au brûleur. Pour schématiser, on peut dire que la flamme est maintenue stable si sa vitesse de propagation est localement équivalente à la vitesse de l'écoulement. Etant donné que la richesse est un paramètre fondamental pour contrôler la vitesse de propagation du front de flamme, sa valeur influence donc naturellement la stabilité des flammes. De même, la courbure et l'étirement, qui sont des paramètres influençant la structure du front de flamme et donc sa vitesse de propagation, jouent un rôle important dans le mécanisme de stabilisation.

2.2.2 Flammes de diffusion

La flamme de diffusion, appelée aussi flamme non-prémélangée, se forme lorsque l'oxydant et le carburant sont introduits séparément comme illustré sur la figure 2.2. Une configuration simple de telles flammes est celle où seul le combustible est issu d'un injecteur ; le comburant nécessaire à la réaction est alors fourni par l'air ambiant.

Ces flammes ne bénéficient d'aucun mécanisme d'auto-propagation, puisqu'elles ne peuvent exister que dans la zone où le combustible et le comburant coexistent en proportions équivalentes. Ce mode de combustion, qui est plus facile à maîtriser, a le désavantage de former plus de polluants, à cause des hautes températures atteintes dans le front de flamme.

Les flammes de ce régime de combustion sont essentiellement contrôlées par l'intensité du mélange qui est à son tour contrôlée par la diffusion. L'étude de la structure interne de ce type

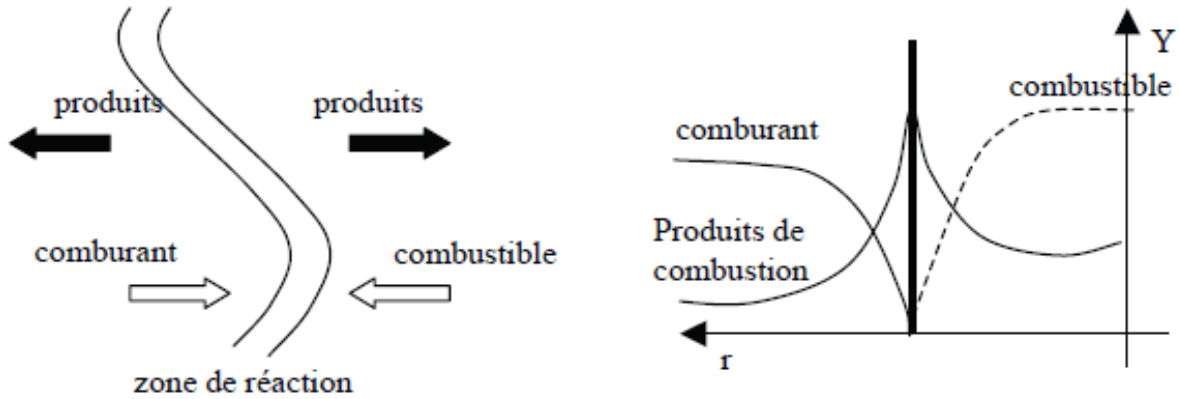


Figure 2.2 – Structure d'une flamme de diffusion [20].

de flammes implique donc la caractérisation du mélange. Dans ce contexte, il est primordial d'introduire la notion de la fraction de mélange (notée Z) : c'est un scalaire passif, qui évolue entre 0 et 1 selon que l'on se situe dans l'écoulement d'air ou de carburant pur, correspondant à la définition suivante :

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1}$$

où $Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ sont les fractions massiques de fuel et d'oxydant dans les flux initiaux, tandis que Y_F et Y_O sont les fractions massiques locales. La fraction de mélange à la stoechiométrie, équivalente à la richesse : $\phi = 1$, est définie par :

$$Z_{st} = \frac{Y_{O,0}}{Y_{O,0} + sY_{F,0}}$$

De manière analogue à la richesse, quand $Z < Z_{st}$, on se situe du côté pauvre ; et du côté riche lorsque $Z > Z_{st}$. En réalité, la combustion ne se produit pas uniquement à la stoechiométrie mais aussi dans la zone d'inflammabilité de part et d'autre (pauvre et riche).

La flamme de diffusion s'accroche au brûleur, comme le montre la figure 2.3, si les échanges thermiques avec la flamme permettent à la lèvre du brûleur de rester suffisamment chaude. Cependant, une augmentation de la vitesse du jet de combustible peut conduire au décrochage ou l'extinction par diminution de la température de la lèvre du brûleur. En effet, le comportement des flammes suspendues dépend essentiellement de la vitesse du jet. Par exemple, selon Kalghatgi [21], l'évolution de la hauteur moyenne de flamme est quasi-linéaire en fonction de la vitesse de sortie des gaz quelle que soit la nature du gaz.

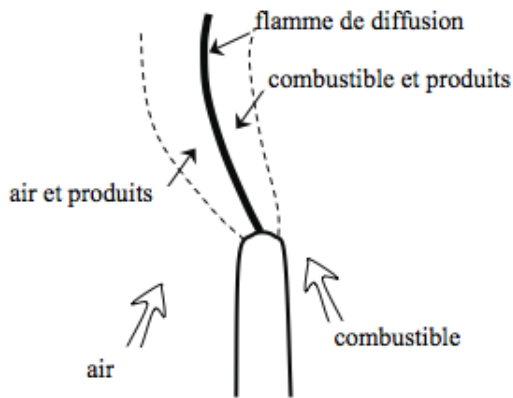


Figure 2.3 – Stabilisation d'une flamme de diffusion sur la lèvre d'un brûleur [20].

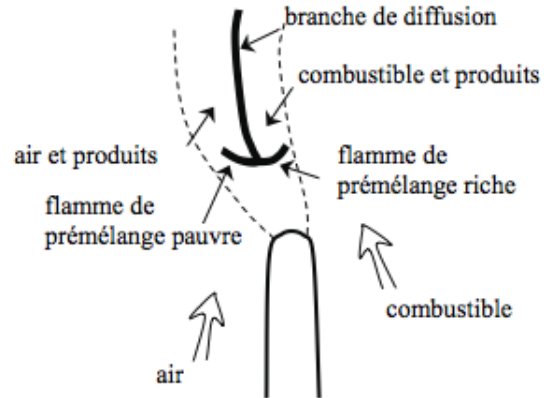


Figure 2.4 – Stabilisation d'une flamme de diffusion suspendue et apparition de la flamme partiellement prémélangée [20].

Donc, à partir d'une flamme de diffusion accrochée au brûleur, lorsque l'on augmente la vitesse jusqu'à une certaine valeur critique dite « vitesse de décrochage », la flamme se décroche de l'injecteur et se place en aval à une hauteur où les conditions locales d'écoulement et de richesse lui permettent de se stabiliser. La figure 2.4 montre la structure générale d'une flamme suspendue et stabilisée. Si la vitesse devient très importante, la flamme se souffle. À l'inverse, lorsque l'on diminue la vitesse débitante jusqu'à une valeur appelée « vitesse de raccrochage », la hauteur diminue jusqu'à ce que la flamme se raccroche à l'injecteur. Il convient de noter que la vitesse limite de raccrochage est plus faible que la vitesse de décrochage. C'est le phénomène d'hystérésis.

À des hauteurs de suspension importantes, la flamme devient très instable. La hauteur de suspension de la flamme, appelée aussi hauteur d'accrochage ou hauteur de stabilisation, qui est la distance entre la sortie de l'injecteur et la base de la flamme, est donc un paramètre important pour étudier la stabilité des flammes.

Lorsque la flamme est décrochée et stabilisée, des zones de combustion de prémélange et de diffusion coexistent introduisant un autre mode de combustion appelé partiellement prémélangée (cf. figure 2.4), qui sera décrit dans la section suivante.

2.2.3 Flammes partiellement prémélangées

La combustion partiellement prémélangée est un mode de combustion intermédiaire retrouvé fréquemment dans les applications industrielles. Il est établi lorsque les deux régimes canoniques (prémélange et diffusion) de combustion coexistent. En réalité, les caractéristiques propres à

Chapitre 2. Généralités sur la combustion et les flammes

ces deux régimes, c'est-à-dire soit un mélange parfait soit une absence totale de mélange, sont trop restrictives pour s'appliquer à la majorité des flammes rencontrées dans les laboratoires ou les installations industrielles. Dans de nombreuses configurations de flamme de diffusion, une zone de mélange peut avoir lieu avant la zone de réaction [22, 23]. Dans ces conditions, il s'agit de combustion partiellement prémélangée. Cette dernière peut être également présente dans des configurations initialement de prémélange [24, 25]. En effet, lorsque le mélange initial des réactifs est riche, une seconde zone de combustion de nature non prémélangée peut entourer la zone de combustion prémélangée. Dans ce cas, la présence simultanée des deux régimes classiques de flammes est favorable.

La base de la flamme de diffusion suspendue présente une région à caractère propagatif se caractérisant par une réactivité plus importante que les autres régions de la flamme [9]. Cette partie propagative de la flamme se stabilise en équilibre avec la vitesse locale de l'écoulement et adapte sa structure en fonction de l'écoulement [22]. Les caractéristiques dynamiques et de mélange dans cette zone sont donc mises en avant pour étudier la stabilisation des flammes décrochées partiellement prémélangées.

Les flammes partiellement prémélangées sont souvent abordées selon le terme de « flamme triple ». Ce terme provient de sa structure spatiale caractéristique qui est composée de deux branches prémélangées (l'une riche, l'autre pauvre) et une branche de diffusion de queue. Une représentation classique (figure 2.5) est fournie par Ruetsch et al. [26].

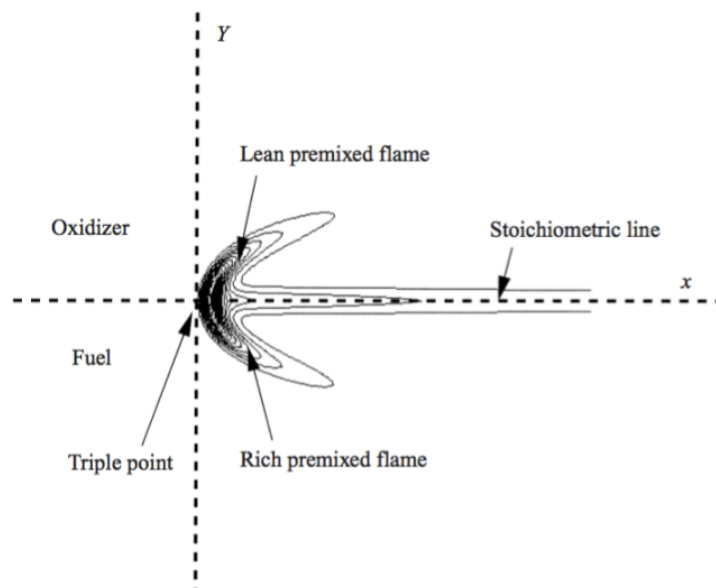


Figure 2.5 – Représentation de flamme triple, résultats de calcul DNS [26].

Cette structure de flamme triple joue un rôle capital dans la propagation et la stabilisation des flammes non-prémélangées. Sa caractérisation peut donc être une première étape pour la compréhension du mécanisme de stabilité des flammes partiellement prémélangées. L'importance des flammes triples pour étudier les mécanismes de stabilité des flammes, notamment dans des problématiques de vitesse de propagation et d'accrochage de flamme, a été largement mise en évidence dans la littérature [24, 27, 28]. Selon plusieurs études [29, 30], la base de la flamme triple (le point triple) se propage le long de la ligne stœchiométrique ; la flamme suspendue devrait donc se stabiliser lorsque la vitesse d'écoulement est proche de la vitesse de propagation d'un prémélange stœchiométrique [9].

En introduisant l'effet du dégagement de chaleur sur la vitesse de flamme, Ruetsch et al. [26] ont montré numériquement que la flamme triple est principalement contrôlée par deux paramètres interdépendants qui sont le taux de dégagement de chaleur et la courbure du front de flamme. D'après ces auteurs, les lignes de courant de l'écoulement, sous l'effet de l'expansion thermique, divergent en amont du point triple de la flamme ; la vitesse décroît alors au niveau du point triple pour atteindre une valeur proche de celle d'une flamme plane laminaire à la stœchiométrie (S_L^0). La flamme se stabilise donc dans cette zone où la vitesse de flamme est en équilibre avec la vitesse locale de l'écoulement. Cette vitesse a été mesurée par de nombreux autres auteurs [24, 31] qui obtiennent effectivement des valeurs très proches de la vitesse de propagation d'une flamme plane laminaire stœchiométrique.

Par ailleurs, les conditions du mélange influencent fortement la courbure du front de flamme et par conséquent la vitesse de propagation, qui est sensible à l'étirement de la flamme courbée. L'influence du gradient de la fraction de mélange sur la vitesse de propagation n'est pas déterminée formellement ; et toutes les études n'aboutissent pas aux mêmes conclusions. Mais, la plupart des auteurs [26, 31] ont conclu que la vitesse de propagation décroît avec l'augmentation du gradient de la fraction de mélange. D'autres auteurs [32] ont déterminé une valeur critique de ce gradient à partir de laquelle une augmentation de celui-ci induit une diminution de la vitesse de propagation. Ce résultat est en accord avec les auteurs précédents et peut s'expliquer par l'effet de l'étirement sur la vitesse de propagation.

Des analyses plus détaillées sur les mécanismes de stabilité des flammes partiellement prémélangées et des flammes triples sont présentées dans les travaux de thèse de Lacour [20] et de Boulanger [33].

2.3 Outils de modélisation de la combustion

Compte tenu des énormes enjeux liés à la conception des appareils de combustion en termes de rentabilité et de sécurité humaine, l'étude de la combustion par voie numérique, de par sa flexibilité, est un outil essentiel à la fois pour les ingénieurs et les chercheurs. La modélisation de la combustion est très complexe et nécessite la maîtrise de deux aspects interdépendants : l'aspect théorique et l'aspect numérique ; ce dernier complète le premier aspect en prédisant le phénomène de la combustion par la résolution des équations qui le régissent.

2.3.1 Équations de conservation pour les écoulements réactifs

L'étude numérique de la combustion dans un écoulement réactif multi-espèces revient à la résolution d'un ensemble d'équations couplées caractéristiques à cet écoulement. Ces équations de bilan dites : « équations de l'aérothermochimie » traduisent l'évolution thermodynamique des différentes variables de l'écoulement au cours du temps.

2.3.1.1 Variables primitives

Les variables primitives caractéristiques à un écoulement multi-espèces, tridimensionnel, compressible et réactif sont :

- la densité, ρ .
- les 3 composantes du vecteur de vitesse, u_i .
- une variable pour l'énergie (température T , enthalpie H , ...).
- et les fractions massiques, Y_k , de N_{spe} espèces constituant le mélange réactif.

Donc, une simulation d'un problème de combustion exige la résolution d'au moins ($N_{spe} + 5$) équations de transport.

Pour résoudre numériquement un problème de combustion, il est nécessaire de définir quelques notions sur les différents aspects intervenants : thermodynamique, transport et cinétique chimique.

Thermodynamique :

L'hypothèse fréquemment admise en modélisation de la combustion [34] pour la description de la phase porteuse est celle du gaz parfait :

$$p = \rho \frac{R}{W} T$$

2.3 Outils de modélisation de la combustion

où p désigne la pression statique, W la masse molaire moyenne du mélange, et R ($=8,314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) est la constante universelle des gaz parfaits.

La combustion produit de multiples espèces impliquées dans plusieurs réactions chimiques. Ces espèces sont caractérisées par leurs fractions massiques, Y_k , et leurs masses molaires, W_k , de $k=1$ à $k=N_{spe}$ où N_{spe} est le nombre d'espèces constituant le mélange réactif. La masse molaire moyenne de ce mélange est donnée par :

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^{N_{spe}} \frac{Y_k}{W_k}$$

Les fractions massiques sont souvent utilisées dans les codes de combustion pour quantifier les densités des espèces dans le milieu gazeux, mais d'autres quantités telles que les fractions molaires et les concentrations molaires sont également couramment introduites.

L'énergie dans les écoulements réactifs peut s'exprimer sous différentes formes (enthalpie, énergie ou température). Nous travaillons dans cette étude avec l'énergie totale non chimique, E_t ; elle est définie ainsi :

$$E_t = e_s + \frac{1}{2}u_i u_i$$

Il convient de noter que la convention de sommation ici, comme dans le reste du manuscrit, n'est utilisée que pour les coordonnées spatiales.

L'énergie sensible, e_s , peut être obtenue via la relation :

$$e_s = h_s - \frac{p}{\rho}$$

en explicitant les termes de droite de la dernière relation, on aura :

$$e_s = \int_{T_0}^T c_p(t, Y_1, \dots, Y_{N_{spe}}) dT - \frac{RT}{W}$$

sachant également que c_p est liée à c_v par :

$$c_p - c_v = \frac{R}{W}$$

l'énergie sensible peut être écrite finalement sous la forme :

$$e_s = \int_{T_0}^T c_v(t, Y_1, \dots, Y_{N_{spe}}) dT - \frac{RT_0}{W}$$

où T_0 est la température de référence (usuellement 298,15 K).

Chapitre 2. Généralités sur la combustion et les flammes

Les capacités calorifiques massiques de mélange à pression constante, c_p , et à volume constant, c_v , sont, respectivement, définies comme suit :

$$c_p = \sum_{k=1}^{N_{spe}} c_{pk}(T)Y_k$$

$$c_v = \sum_{k=1}^{N_{spe}} c_{vk}(T)Y_k$$

ici c_{pk} et c_{vk} dénotent, respectivement, les capacités calorifiques massiques à pression constante et à volume constant de l'espèce k . Les valeurs de ces deux quantités sont sensibles à la température, c'est pourquoi elles sont généralement tabulées en fonction de la température [35, 36].

Diffusion moléculaire et thermique :

La description du processus de transport par diffusion implique des coefficients de diffusion binaires, D_{ij} , et requiert la résolution d'un système permettant d'avoir les vitesses de diffusion en utilisant la théorie cinétique des gaz. Ceci est très complexe (voir l'ouvrage [37] par exemple) ; par conséquent, des lois de diffusion simples, généralement la loi de Fick, sont utilisées dans la majorité des codes de combustion. Le coefficient de diffusion, D_k , d'une espèce k est souvent caractérisé par le nombre de Lewis défini ainsi :

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho C_p D_k} = \frac{D_{th}}{D_k}$$

D_{th} ($= \frac{\lambda}{\rho C_p}$) est le coefficient de diffusivité thermique et λ est la conductivité thermique. Le nombre de Lewis, Le_k , compare les vitesses de diffusion thermique et de diffusion moléculaire des espèces. C'est une quantité locale, mais dans la plupart des gaz, il change très peu d'un point à un autre du milieu.

Le nombre de Lewis, Le_k , relie les nombres de Prandtl, Pr , et de Schmidt, Sc_k , par la relation :

$$Sc_k = Pr \cdot Le_k$$

Le nombre de Prandtl, Pr , compare la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique :

$$Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}$$

2.3 Outils de modélisation de la combustion

tandis que le nombre de Schmidt, Sc_k , compare la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusion moléculaire de l'espèce k :

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k}$$

Pour calculer la viscosité dynamique concernant un gaz, μ , il est courant d'utiliser la loi de Sutherland [38], définie de la façon suivante :

$$\frac{\mu_0}{\mu(T)} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{T_0 + S}{T + S}$$

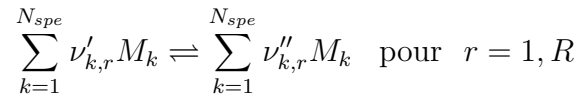
$\mu_0 = \mu(T_0)$ est la viscosité à la température T_0 et S est la température de Sutherland. Par exemple, les valeurs caractérisant l'air sont : $\mu_0 = 1,711 \times 10^{-5}$ (Pa·s), $T_0 = 273,15$ (K) et $S = 110,4$ (K), ce qui donne une bonne approximation sur une plage de température de l'ordre de 170 à 1900 (K) environ.

Les effets Soret (diffusion moléculaire des espèces due aux gradients de température) et Dufour (flux du chaleur causé par les gradients des fractions massiques des espèces) sont généralement négligés dans les études du phénomène de combustion.

Cinétique chimique :

La thermodynamique permet, si l'on connaît l'état initial du mélange réactif, de déterminer son état d'équilibre chimique et thermique final. Cependant, le calcul d'équilibre ne permet pas de connaître comment on est passé de l'état initial à l'état final d'équilibre. De plus, dans certains cas, l'équilibre peut ne pas être atteint. Il est donc important de pouvoir décrire l'évolution du mélange réactif.

Considérant un système chimique de N_{spe} constituants représentés par leurs symboles M_k réagissant par R réactions. Une réaction chimique, r , de ce système ayant lieu dans les deux sens s'écrit sous une forme générale comme suit :



où $\nu'_{k,r}$ et $\nu''_{k,r}$ sont, respectivement, les coefficients molaires stœchiométriques de l'espèce k dans les réactifs et dans les produits de la réaction r . La condition de conservation de masse exige que :

$$\sum_{k=1}^{N_{spe}} \nu'_{k,r} W_k = \sum_{k=1}^{N_{spe}} \nu''_{k,r} W_k$$

Chapitre 2. Généralités sur la combustion et les flammes

Le taux massique de production ou de consommation de l'espèce k par la réaction r s'exprime par la relation suivante :

$$\dot{\omega}_{k,r} = W_k(\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \left[k_{fr}(T) \prod_{k=1}^{N_{spe}} [X_k]^{\nu'_{k,r}} - k_{br}(T) \prod_{k=1}^{N_{spe}} [X_k]^{\nu''_{k,r}} \right] \quad (2.3.1)$$

où k_{fr} et k_{br} sont, respectivement, les taux direct et inverse de la réaction r .

Le taux massique total de production ou de consommation d'une espèce k , dans un système chimique composé de R réactions, résulte donc de la somme des taux de toutes les réactions :

$$\dot{\omega}_k = \left(W_k \frac{\partial [X_k]}{\partial t} \right)_{chimique} = \sum_{r=1}^R \dot{\omega}_{k,r} \quad (2.3.2)$$

Notons ici que, $[X_k]$, dénote la concentration molaire¹ de l'espèce, k , obtenue ainsi :

$$[X_k] = \frac{\rho Y_k}{W_k}$$

Généralement, une loi empirique d'Arrhenius est appliquée pour calculer les vitesses des réactions directes (sens : réactifs \mapsto produits) :

$$k_{fr}(T) = A_r T_r^{n_r} \exp\left(\frac{-E_{ar}}{RT}\right) \quad (2.3.3)$$

Les trois paramètres : la constante préexponentielle, A_r , l'exposant de température, n_r , et l'énergie d'activation, E_{ar} , sont approximés grâce à des interpolations à partir des mesures expérimentales. Des bases de données de leurs valeurs sont disponibles avec les différents mécanismes de cinétiques chimiques adaptées à la combustion.

Les taux des réactions inverses (sens : produits \mapsto réactifs) se déterminent à partir des constantes d'équilibre thermodynamique, k_{cr} , via :

$$k_{br} = \frac{k_{fr}}{k_{cr}} \quad (2.3.4)$$

Avec :

$$k_{cr} = \left(\frac{p_0}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^{N_{spe}} (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r})} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r \bar{G}^0(T)}{RT}\right)$$

p_0 désigne la pression standard (=1 bar = 10^5 atm). La variation de l'enthalpie libre $\Delta_r \bar{G}^0$ de

1. Nombre de moles par unité de volume.

la réaction r s'obtient à partir des tables thermodynamiques [39].

2.3.1.2 Représentation des équations

Les équations de l'aérothermochimie invoquent le principe de conservation associé au premier principe de la thermodynamique. Pour décrire un système de combustion, ce principe de conservation doit être appliqué pour le bilan de masse, de quantité de mouvement, des espèces chimiques constituant le mélange réactif et enfin l'énergie thermique.

Équation de conservation de la masse : Pour un écoulement d'un gaz de densité, ρ , et de composantes de vitesse, u_i , l'équation de conservation de masse s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.5)$$

où t et x_i sont, respectivement, le temps et les coordonnées spatiales.

Équation de conservation de la quantité de mouvement : L'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{spe}} Y_k f_{k,j} \quad (2.3.6)$$

τ_{ij} désigne le tenseur des contraintes visqueuses défini par :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

avec δ_{ij} : le symbole de Kronecker.

$f_{k,j}$ est la force massique agissant sur l'espèce k dans la direction j .

Équation de conservation des espèces : L'équation de conservation de la masse de l'espèce k s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho Y_k V_{k,j}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (2.3.7)$$

où $V_{k,j}$ est la vitesse de diffusion dans la direction j . En général, le flux de diffusion est simplement représenté par la loi de Fick avec un nombre de Schmidt, Sc , constant :

$$\rho Y_k V_{k,j} = -\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad \text{et} \quad D_k = D = \frac{\mu}{\rho Sc}$$

Chapitre 2. Généralités sur la combustion et les flammes

On a par principe de conservation de masse :

$$\sum_{k=1}^{N_{spe}} Y_k V_{k,j} = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{N_{spe}} \dot{\omega}_k = 0$$

Tenant compte de ces deux dernières identités, on peut vérifier facilement que, si toutes les équations de conservation des espèces (éq.2.3.7) sont ajoutées, l'équation de conservation de masse (éq.2.3.5) serait rétablie comme suit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^{N_{spe}} Y_k V_{k,i} \right) + \sum_{k=1}^{N_{spe}} \dot{\omega}_k = 0 \quad (2.3.8)$$

L'utilisation d'une loi de Fick pour décrire le flux de diffusion des espèces ne satisfait pas la dernière condition, puisque : $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^{N_{spe}} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) \neq 0$; et donc la masse globale n'est pas conservée. Deux méthodes peuvent être utilisées pour maintenir la conservation de la masse globale :

- Résoudre l'équation de conservation de masse et seulement $(N_{spe} - 1)$ équations des espèces. La fraction massique de la dernière espèce (usuellement un diluant comme le N_2) est obtenue en écrivant : $Y_{N_{spe}} = 1 - \sum_{k=1}^{N_{spe}-1} Y_k$
- Ajouter une vitesse de correction, V^C , à la vitesse de convection dans les équations de transport des espèces. :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial (u_j + V_j^C) \rho Y_k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_k \quad (2.3.9)$$

Cette vitesse de correction est calculée pour assurer la conservation de masse globale :

$$V_j^C = \sum_{k=1}^{N_{spe}} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}$$

Dans la littérature, la modélisation de la diffusion multiespèces dans les écoulements réactifs avec un transport détaillé a fait quand même l'objet de plusieurs ouvrages [37, 40] et articles [41, 42].

Équation de conservation de l'énergie : L'équation de conservation de l'énergie peut s'exprimer sous différentes formes (enthalpie, énergie ou température) [34]. L'énergie totale non

2.3 Outils de modélisation de la combustion

chimique, E_t , est choisie dans cette étude :

$$\frac{\partial \rho E_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i E_t}{\partial x_i} = \dot{\omega}_T - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial (\tau_{ij} - p \delta_{ij}) u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_{spe}} Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) \quad (2.3.10)$$

q_i est le flux de chaleur calculé à partir de la relation :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^{N_{spe}} h_{sk} Y_k V_{k,i}$$

ce flux induit un terme de diffusion de la chaleur exprimé par la loi de Fourier ($-\lambda \partial T / \partial x_i$), et un second terme associé à la diffusion des espèces. L'enthalpie sensible de l'espèce k est supposée tel que :

$$h_{sk} = \int_{T_0}^T c_{pk}(T) dT$$

Les termes $\dot{\omega}_T$ et \dot{Q} sont, respectivement, le terme source d'énergie chimique (chaleur dégagée par la combustion) et le terme source d'énergie autre (due par exemple à un allumage par bougie, laser ou les flux radiatifs, etc...). Ce dernier ne sera pas considéré par la suite, tout comme la prise en compte du transfert diffusif d'enthalpie sensible (usuellement négligeable comparé à $\dot{\omega}_T$). Notons que :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{spe}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k$$

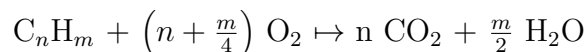
ici $\Delta h_{f,k}^0$ dénote l'enthalpie massique de formation de l'espèce k . Les valeurs de cette propriété sont disponibles dans les bases de données thermodynamiques.

2.3.2 Modélisation de la cinétique chimique de combustion

À la base du phénomène de combustion, se trouve d'abord un aspect chimique : et il ne s'agit pas d'une seule réaction chimique, mais de nombreuses réactions chimiques élémentaires qui ont lieu simultanément pendant le processus de combustion et qui dépendent essentiellement des réactifs mis en jeu. Donc, il semble bon de rappeler ici les manières de représenter et de modéliser la chimie de combustion.

2.3.2.1 Représentation de la chimie de combustion

La réaction globale de combustion peut être présentée ainsi :



Cette réaction ne donne en fait qu'un bilan de matière et d'énergie, mais ne reflète aucunement le mécanisme de la combustion. En réalité, elle se fait par une succession d'au moins deux réactions élémentaires impliquant des radicaux et constituent les étapes de propagation de la réaction. Cette succession des étapes élémentaires, qui se reproduisent d'une manière cyclique, peut en principe continuer indéfiniment formant ainsi une chaîne réactionnelle.

Une chaîne ou un mécanisme réactionnel décrit : chaque état de transition, quelles liaisons sont rompues et dans quel ordre, quelles liaisons sont reformées et dans quel ordre, ainsi que la vitesse de chaque réaction. Les mécanismes chimiques réels de combustion sont, dans la plus part des cas, très complexes à cause du nombre élevé d'espèces et de réactions qui les constituent. En conséquence, des mécanismes fortement simplifiés sont développés par les cinéticiens pour représenter la chimie de combustion. Globalement, trois types de représentations existent : globale, réduite et détaillée.

Mécanismes globaux : Ces schémas chimiques, d'une grande simplicité, mettent en jeu un nombre très limité d'espèces et de réactions. Généralement basés sur des hypothèses simplificatrices, ils ne donnent pas toujours des résultats précis. Parmi ces schémas, les plus simples font appel à une seule réaction globale mettant en jeu quatre espèces chimiques. Néanmoins, le domaine d'application est limité à la prévision des vitesses de flammes et de certaines limites d'inflammabilité. Un tel mécanisme est incapable de prévoir l'évolution des espèces intermédiaires stables ainsi que les délais d'auto-inflammation ; de plus, il conduit à une température adiabatique finale très élevée [43].

Mécanismes réduits : La représentation réduite considère un mécanisme réactionnel simplifié obtenu, à partir d'un mécanisme détaillé, après élimination des espèces chimiques mineures et des réactions dont la vitesse est négligeable ou qui ne sont pas déterminantes. Le recours à de tels mécanismes réduits s'impose généralement dans les codes de calcul industriels. L'enjeu est alors de trouver un nombre minimal d'espèces et de réactions qui assure une performance maximale tout en conservant la précision la plus proche possible des schémas détaillés originels, notamment ce qui concerne la température, les fractions des espèces, les délais d'auto-inflammation et les vitesses de flammes. Cependant, le choix d'espèces majoritaires est difficile, car il dépend du temps d'existence des espèces et de l'état initial du mélange.

Mécanismes Détaillés : Un mécanisme réactionnel détaillé peut être écrit en considérant toutes les réactions élémentaires et toutes les espèces chimiques (molécules, atomes et radicaux libres) susceptibles de prendre part au processus réactionnel global. Compte tenu de leur taille

et des temps de calcul qu'ils imposent, les mécanismes détaillés sont inutilisables dans les codes de combustion industriels.

Le développement et la validation de ces schémas réduits ou détaillés sont des étapes indispensables et nécessaires au développement des codes de combustion. Actuellement, il existe un certain nombre de schémas détaillés ou réduits optimisés pour plusieurs combustibles et validés dans de larges plages de fonctionnement. On cite, par exemple, le mécanisme très détaillé GRI-MECH 3.0 [44], qui présente une compilation de 325 réactions chimiques élémentaires et les expressions des taux associées avec les paramètres thermochimiques de 53 espèces qui y participent. Le GRI-MECH 3.0 a été optimisé pour la combustion du méthane et du gaz naturel. Ainsi, sa performance a été validée pour une vaste gamme de conditions de combustion : une température allant de 1000 à 2500 (K), une pression variant entre 0,01 et 10 (atm), et une richesse de 0,1 à 5. En général, les schémas de cinétique chimique sont donnés dans des tables dans le format standard de CHEMKIN [45]. Comme montré sur la figure 2.6 schématisant un extrait du mécanisme GRI-MECH 3.0, tout d'abord, les éléments et les espèces qui ont été retenus dans le mécanisme réactionnel sont listés ; pour chaque réaction, la table donne ensuite A_{fr} avec les unités en (cgs), n_r (sans unité) et E_{ar} en (cal/mol).

2.3.2.2 Méthode de tabulation

L'utilisation de schémas cinétiques détaillés pour étudier certains problèmes de combustion tels que les délais d'allumage, les concentrations des polluants ou encore l'interaction combustion et champ électrique, est nécessaire pour avoir la précision recherchée. Cependant, la complexité du mécanisme devient rapidement croissante avec la précision. Les mécanismes chimiques pour la combustion de carburants usuels peuvent parfois contenir plusieurs centaines d'espèces et de réactions élémentaires (plus de 50 espèces pour les hydrocarbures les plus simples) ; par exemple, le mécanisme de Konnov [46] dédié aux hydrocarbures, qui ne faisant intervenir que les molécules composées de un à trois atomes de carbone, implique 115 espèces et 894 réactions. Un tel mécanisme demande des efforts significatifs pour calculer les écoulements réactifs à cause du nombre élevé d'équations de transport à résoudre. En réponse à cette problématique, différentes techniques pour réduire les cinétiques chimiques détaillées sont proposées. Une présentation non-exhaustive des principales méthodes existantes est réalisée dans les travaux de thèse de Savre [47] et de Naudin [17]. Dans ce qui suit, on ne décrira en détail que la méthode de réduction de la chimie utilisée dans cette étude, à savoir l'approche de chimie détaillée tabulée FPI : « Flame Propagation of Intrinsic Low Dimensional Manifold (ILDM) » qui a montré une grande flexibilité et une efficacité significative pour modéliser la chimie des écoulements réactifs.

Chapitre 2. Généralités sur la combustion et les flammes

```
! GRI-Mech Version 3.0 7/30/99 CHEMKIN-II format
! See README30 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;
! WorldWideWeb home page http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ or
! through http://www.gri.org , under 'Basic Research',
! for additional information, contacts, and disclaimer
ELEMENTS
O H C N AR
END
SPECIES
H2      H      O      O2      OH      H2O      HO2      H2O2
C       CH     CH2    CH2 (S)  CH3     CH4      CO       CO2
HCO     CH2O    CH2OH  CH3O     CH3OH   C2H      C2H2     C2H3
C2H4    C2H5    C2H6   HCCO     CH2CO   HCCOH    N        NH
NH2     NH3     NNH     NO       NO2     N2O      HNO      CN
HCN     H2CN    HCNM    HCNO     HOCN    HMCO     NCO      N2
AR      C3H7    C3H8    CH2CHO   CH3CHO
END
!THERMO
! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file
!END
REACTIONS
2O+M<=>O2+M                      1.200E+17  -1.000  .00
H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/
O+H+M<=>OH+M                      5.000E+17  -1.000  .00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+H2<=>H+OH                        3.870E+04   2.700  6260.00
O+HO2<=>OH+O2                      2.000E+13   .000   .00
O+H2O2<=>OH+HO2                    9.630E+06   2.000  4000.00
O+CH<=>H+CO                         5.700E+13   .000   .00
O+CH2<=>H+HCO                      8.000E+13   .000   .00
O+CH2 (S) <=>H2+CO                 1.500E+13   .000   .00
O+CH2 (S) <=>H+HCO                 1.500E+13   .000   .00
O+CH3<=>H+CH2O                     5.060E+13   .000   .00
O+CH4<=>OH+CH3                     1.020E+09   1.500  8600.00
O+CO (+M) <=>CO2 (+M)              1.800E+10   .000  2385.00
```

Figure 2.6 – Extrait du mécanisme réactionnel GRI-MECH 3.0 [44].

Le modèle FPI [48, 49] fait partie des modèles basés sur la tabulation de la chimie détaillée. Les informations essentielles sur la cinétique chimique (fractions massiques, termes source d'espèces et/ou d'énergie) sont stockées dans une base de données et indexées selon un certain nombre de variables de contrôle. Dans le formalisme actuel de FPI, ces grandeurs sont la fraction de mélange, Z , et la variable d'avancement, Y_c . FPI suppose que toute structure de flamme peut être cartographiée dans le sous espace (Z, Y_c) ; elle repose sur l'approche de flammelettes de prémélange proposée par Bradley [50]. Ce modèle a été développé pour répondre aux difficultés rencontrées par la méthode ILDM dans la région de basses températures.

La méthode ILDM : « Intrinsic Low Dimensional Manifold », exposée pour la première fois par Maas et Pope [51, 52] en 1992, propose une procédure de réduction automatique de la cinétique chimique basée sur l'étude des temps caractéristiques chimiques. Les auteurs constatent que les évolutions des fractions massiques d'espèces suivent, après un délai très court, un ensemble

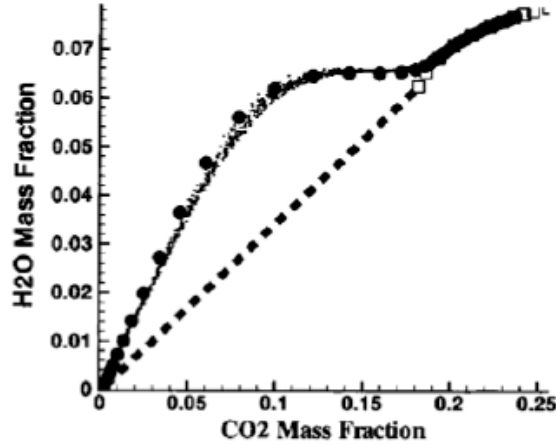


Figure 2.7 – Projection d’une flamme prémélangée turbulente (DNS) CO/H₂/Air en chimie complexe dans le sous-espace (Y_{CO_2}, Y_{H_2O}). (Carré transparent) : état d’équilibre, (cercle plein) : Trajectoire flamme laminaire 1D dans les mêmes conditions, (ligne continue) : approximation linéaire de la zone froide [49].

de trajectoires bien définies si l’on se place dans un certain sous-espace qui est appelé : « la variété ». Ceci conduit à supposer que le système chimique relaxe rapidement vers un sous-espace attracteur de dimensions réduites. La détermination de ce sous-espace peut se faire à partir d’un mécanisme réactionnel détaillé pour construire des tables regroupant l’évolution de l’ensemble des variables thermochimiques en fonction d’un nombre réduit de paramètres. Les coordonnées de ce sous-espace sont en général à choisir arbitrairement parmi les fractions massiques de produits de combustion (figure 2.7). Toutefois, cette formulation présente des limites : les tables ILDM sont valables uniquement dans les zones à température élevée (typiquement pour $T > 1200$ K). De plus, les flammes résultent, en pratique, de la compétition entre la chimie et d’autres phénomènes physiques ; et le fait qu’ILDM ne considère qu’un système réactif simplifié, uniquement piloté par la chimie, limite également sa validité.

L’apport de la méthode FPI est de s’intéresser à des évolutions thermodynamiques de mélanges gazeux (tout comme ILDM), mais dont la structure spatiale correspond au cas de la flamme laminaire prémélangée. La zone de basse température, qui est mal gérée par la méthode ILDM, correspond alors à la région des gaz frais et au début de la zone de préchauffage. Le principe de base consiste à tabuler, dans l’espace de la fraction de mélange et d’une variable d’avancement, les fractions massiques des espèces chimiques, leurs taux de production et la température. Cette méthode de tabulation permet de couvrir la totalité du domaine de combustion. Au-delà des limites d’inflammabilité, les termes sources chimiques sont négligeables, la flamme ne se propage plus et une prolongation linéaire dans l’espace de Z est souvent adoptée

pour les espèces chimiques.

Ce type de tabulation est applicable aux flammes prémélangées, mais aussi aux flammes non-prémélangées lorsque le combustible est mélangé à l'échelle moléculaire au comburant avant de réagir (flammes partiellement prémélangées). Néanmoins, tandis que cette approche est utilisée avec succès pour les flammes prémélangées, elle présente des limites dans le cas des flammes de diffusion et partiellement prémélangées. En général, elle échoue lorsqu'elle est appliquée à des flammes de diffusion ou partiellement prémélangées riches en carburant [53]. Dans ces flammes, il existe une zone située au voisinage de la région stœchiométrique où les processus de la chimie prémélangée et de la diffusion sont pratiquement similaires. En revanche, en dehors de cette zone, la chimie devient plus lente et les flux diffusifs à travers les iso-surfaces des fractions massiques dominant la réponse de la flamme. Donc, dans le cadre d'une chimie tabulée, des paramètres supplémentaires seraient nécessaires pour reproduire correctement la flamme de diffusion riche [53].

Lors d'une tabulation FPI, les propriétés thermochimiques, Φ_i , de la flamme sont toutes dépendantes de la fraction de mélange, Z , et de l'avancement de la réaction décrit par la variable d'avancement, Y_c :

$$\Phi_i = \Phi_i(Z, Y_c)$$

La fraction de mélange caractérise la richesse du mélange initial (côté gaz frais) ; elle vaut 1 côté carburant et 0 côté comburant, tandis que la variable d'avancement est utile dans la description de l'avancement de la combustion vers l'état d'équilibre.

Différentes définitions de la fraction de mélange existent ; et le choix parmi l'une d'entre elles ne s'impose pas naturellement, puisqu'il est conditionné par les contraintes expérimentales [54, 55]. Une formulation utile dans un contexte de modélisation, mettant en œuvre une réaction globale entre un carburant et un comburant tout en négligeant la diffusion différentielle des espèces et supposant la pureté des réactifs, est la suivante :

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1} \quad (2.3.11)$$

La variable d'avancement est construite à partir de combinaisons de fractions massiques d'espèces présentes dans l'écoulement. Différentes définitions de son expression peuvent être données. Une définition adaptée à la combustion du méthane dans l'air, utilisée dans les travaux de Fiorina et al. [56] et Rullaud [57], est la suivante :

$$Y_c = Y_{CO_2} + Y_{CO} \quad (2.3.12)$$

2.3 Outils de modélisation de la combustion

En effet, en faisant intervenir Y_{CO_2} et Y_{CO} , on tient compte de la dissociation CO/CO_2 à richesse élevée de sorte que la variable d'avancement reste strictement monotone sur une vaste gamme de points de fonctionnement. D'autres définitions de la variable d'avancement, suivant les applications, peuvent également être utilisées. Par exemple, les travaux [58] montrent que l'introduction de la fraction massique de H_2O à la définition de Y_c est utile lorsque les gaz brûlés sont mélangés progressivement aux gaz frais. Ainsi, pour étudier la formation des NO_X , Godel [16] a fait intervenir les fractions massiques des espèces NO et N_2 . Le choix de la définition de Y_c reste important ; une évolution homogène dans toute la flamme est nécessaire, ce qui écarte les espèces ayant des cinétiques chimiques très lentes ou très rapides.

À partir des équations de conservations des espèces (éq.2.3.7), on peut déduire aisément les équations de transport pour le scalaire passif, Z , et le scalaire réactif, Y_c :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Z}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_j}) \quad (2.3.13)$$

$$\frac{\partial \rho Y_c}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho D_{Y_c} \frac{\partial Y_c}{\partial x_j}) + \dot{\omega}_{Y_c} \quad (2.3.14)$$

où D_Z et D_{Y_c} représentent, respectivement, les coefficients de diffusion de la variable d'avancement et de la fraction de mélange ; et $\dot{\omega}_{Y_c}$ est le terme source chimique de Y_c . Les coefficients D_Z et D_{Y_c} sont très délicats à estimer. En pratique, on choisit souvent de les évaluer en supposant un nombre de Schmidt constant (généralement de l'ordre de 0,7).

Un des principaux avantages de la méthode FPI est qu'elle est extensible selon les paramètres de contrôle utilisés. Par exemple, l'ajout de paramètres pour la prise en compte de la turbulence [57], des pertes thermiques [56], de la dilution dans les gaz brûlés [59], des polluants [16], ou encore pour étudier l'auto-allumage [17, 60], est possible

La limitation principale de la méthode FPI se situe dans la définition de la fraction de mélange, en particulier, puisque cela devient difficile à contrôler dès lors que le carburant et oxydant sont injectés par plus de deux entrées à des températures ou des compositions différentes, ce qui est très restreignant pour des configurations industrielles. En outre, la validité de la méthode reste limitée à des cas où la topologie de la flamme est connue et correspond aux hypothèses de construction des lois $Y_k(Z, Y_c)$. Traiter dans le même calcul un allumage, une propagation, et/ou une extinction peut alors devenir très complexe. Enfin, la résolution du transport de Z et Y_c ne dispense pas des problèmes numériques de propagation de front raides, ni du traitement de la raideur des termes sources de la variable d'avancement ($\dot{\omega}_{Y_c}$).

2.4 Descriptif des propriétés ioniques des flammes

Les fondations de cette thématique ont été établies en 1600 quand W. Gilbert, physicien à l'université de la reine Elizabeth 1, a démontré que les gaz de flamme seraient capables de décharger un électroscope². Ensuite, vers 1760, Volta mit en évidence la conductivité des gaz à proximité d'une flamme. Cette conductivité est due à la présence de porteurs de charge électrique (ions et électrons) qui sont produits pendant la combustion. Un demi-siècle plus tard, en 1814, Brande [1] rapporta que le champ électrique influence le transfert de chaleur et de masse entre une flamme de bougie et les électrodes, de telle sorte que la flamme et ses suies sont attirées vers l'électrode chargée négativement. Malgré ces observations anciennes, le sujet n'a atteint sa maturité qu'au début de la deuxième moitié du siècle précédent avec l'arrivée de nouvelles techniques de mesure des espèces dans les flammes (sonde électrique³, spectrométrie de masse⁴).

D'une façon ou une autre, trois questions fondamentales sont généralement abordées lors des études des ions dans les flammes :

- Comment les espèces chargées apparaissent dans la flamme ?
- Quelles sont leurs concentrations et quel rôle jouent elles dans le processus de combustion ?
- Comment utiliser ces propriétés ioniques dans les applications de combustion ?

2.4.1 Formation des ions

L'étude de la formation des ions dans les flammes est un sujet classique. Les articles ayant traité ce sujet sont assez nombreux. Une revue exhaustive des travaux disponibles dans la littérature est signalée dans l'article de Fialkov [4].

À un stade précoce d'investigation (première moitié du 19^{ème} siècle), la présence des ions dans les flammes d'hydrocarbure a été attribuée à un processus thermique d'ionisation accompagné d'un processus de collision des espèces excitées. Une excellente revue des travaux effectués à cette époque, avec une analyse critique des différents mécanismes d'ionisation suggérés, a été publiée en 1957 par Calcote [61]. Il a conclu que le processus de participation des espèces excitées dans les collisions, provoquant une ionisation thermique, peut probablement aussi bien

2. Un électroscope (aussi appelé électromètre) est un appareil de mesure scientifique permettant la mesure ou la mise en évidence de la charge électrique d'un corps.

3. Une sonde est un instrument qui permet de mesurer la température et la densité ionique, ainsi que le potentiel électrique d'un plasma.

4. La spectrométrie de masse (mass spectrometry ou MS) est une technique physique d'analyse permettant de détecter et d'identifier des molécules d'intérêt par mesure de leur masse, et de caractériser leur structure chimique.

2.4 Descriptif des propriétés ioniques des flammes

qu'un processus de chimi-ionisation produire l'ionisation dans la flamme.

Plus tard, l'hypothèse d'ionisation thermique a été écartée et la chimi-ionisation a été acceptée comme la principale source d'ions dans la zone d'ionisation principale des flammes d'hydrocarbures stœchiométriques [62]. Une réaction de chimi-ionisation est, tout simplement, une réaction chimique qui produit des espèces chargées à partir des réactifs neutres. Durant une telle réaction, les liaisons chimiques des corps réagissant sont reconstruites et utilisées pour le détachement d'un électron de l'une des espèces formées. Une réaction de chimi-ionisation qui représente une importante source d'ionisation a été déterminée par Calcote en 1961 [62] :



Plusieurs autres auteurs [63–69] sont également parvenus à la conclusion que la réaction (éq. 2.4.15) est la principale source d'ions dans les flammes d'hydrocarbures pauvres, stœchiométriques et légèrement riches. Cette interprétation a été largement admise dans les études s'intéressant à la détermination de la structure ionique des flammes [70–77]. Dans le cas des flammes très riches, la source d'ions n'est pas encore définitivement établie. En effet, les flammes riches ne contiennent pas assez d'oxygène, atome provoquant l'ionisation (éq. 2.4.15), pour expliquer la concentration ionique de 10^8 - 10^{10} cm^{-3} observée expérimentalement [71, 78]. D'autres réactions de chimi-ionisation supplémentaires sont donc suggérées. Ces réactions prennent en compte la production des cations à partir des espèces excitées [4], en particulier le CH^* , présentes avec des concentrations relativement importantes dans les flammes riches.

Une des rares simulations numériques s'intéressant au sujet de la formation des ions dans les flammes a été réalisée par Brown et Eraslan [68, 69] sur des flammes d'acétylène de prémélange. Les observations expérimentales précédentes sont confirmées. En effet, un accord satisfaisant avec l'expérience en terme de prédiction de la concentration totale des ions dans un large intervalle de richesses pauvres et proches de la stœchiométrie a été obtenu, à condition que l'on prenne le CHO^+ , formé par la réaction (éq. 2.4.15), comme ion primaire. Dans le même temps, il a été conclu que certaines réactions de chimi-ionisation supplémentaires doivent être impliquées pour pouvoir modéliser la structure ionique des flammes riches en carburant.

Comme dit précédemment, il a été communément retenu que la chimie des ions dans les flammes débute par la réaction (2.4.15) conduisant à la production de l'ion précurseur CHO^+ et d'un électron. À partir de ce cation primaire, d'autres cations sont formés via des réactions de transfert de proton [70, 71, 73] :



De l'autre côté, les électrons sont produits dans un bain de molécules neutres avec lesquelles ils réagissent via des réactions d'attachement pour former les premiers anions [71, 76] :



Depuis 1957, date à laquelle furent conçus les premiers spectromètres de masse appliqués à l'étude des flammes [79], les expériences d'identification des ions positifs et négatifs se sont poursuivies, mais il est encore prématuré de proposer pour l'ensemble des ions, relevés dans les spectres de masse, des mécanismes de formation définitifs d'autant plus que l'accord n'est pas entier quant à l'apparition de certains d'entre eux. Cependant, malgré ces différences, « l'identité et la concentration des ions les plus abondants sont reproductibles et leur détermination a permis de dégager quelques conclusions générales et de mettre en lumière certains processus ioniques particulièrement efficaces [79] ».

2.4.2 Concentration et identité des espèces chargées

L'étude de la structure ionique dans les flammes d'hydrocarbures, en particulier les flammes d'acétylène [4], a reçu beaucoup d'intérêt du point de vue expérimental. Cependant, dans ce domaine d'investigation, peu d'auteurs se sont attachés à une étude de la variation de l'ionisation en fonction de la nature des réactifs, de la richesse du mélange ou encore du pourcentage en diluant. Quant aux observations spectrométriques, qui ont permis l'identification d'une grande variété d'ions et de leurs concentrations, elles ont attiré l'attention sur certaines réactions importantes entre ions et molécules neutres.

L'investigation expérimentale des ions dans les flammes comprend, d'une part, la détermination de la quantité d'ions présents dans la flamme (éventuellement de leur distribution) et, d'autre part, l'identification des divers porteurs de charge positive et négative :

2.4.2.1 Ions Positifs :

La concentration totale des ions positifs dans les flammes dépend du carburant, de la richesse du mélange et du degré de dilution par les gaz inertes [4, 8]. Dans les flammes stœchiométriques d'hydrocarbures, elle varie généralement de 10^{10} à 10^{11} (cm^{-3}), et elle atteint rarement 10^{12} (cm^{-3}) [4].

La plupart des études ont porté sur des flammes planes prémélangées d'hydrocarbure et d'air plus ou moins enrichies en oxygène. Le tableau 2.1 présente les résultats des concentrations maximales obtenues dans quelques études. On remarque que les concentrations ioniques

2.4 Descriptif des propriétés ioniques des flammes

Composition	Pression (torr)	Description	Concentration maximale (cm ⁻³)	référence
0,5%CH ₄ /2%O ₂ / 97,5%Ar	760	Tube à choc T _F ~ 2700 K	n ^e = 6 × 10 ¹⁰	[80]
CH ₄ /O ₂ φ = 2,8	760	Flamme conique	n ⁺ = 4 × 10 ¹⁰ n ^{anion} = 1,5 × 10 ¹⁰	[81]
CH ₄ /O ₂ φ=0,2 φ=2,0	760	Flamme conique	n ⁺ = 1,3 × 10 ¹⁰ n ^{anion} = 8,5 × 10 ⁹ n ⁺ = 4 × 10 ¹⁰ n ^{anion} = 1,5 × 10 ¹⁰	[71, 72]
CH ₄ /O ₂ /56%N ₂ φ=1,0	760	Flamme plate T _F ~ 2530 K	n ⁺ = 1,6 × 10 ¹¹	[82]
CH ₄ /Air φ=0,513	760	Flamme plate T _F ~ 1500 K	n ⁺ = 1,75 × 10 ¹⁰	[83]
C ₂ H ₂ /O ₂ φ = 0,93	40	Flamme plate	n ⁺ ~ 10 ¹⁰	[84]
C ₂ H ₂ /O ₂ /N ₂ φ = 1,27 φ = 1,45 φ = 1,59 φ = 2,06	45	Flamme plate	n ⁺ = 7,4 × 10 ¹⁰ n ⁺ = 4,2 × 10 ¹⁰ n ⁺ = 1,7 × 10 ¹⁰ n ⁺ = 0,3 × 10 ¹⁰	[85]
C ₂ H ₂ /O ₂ φ = 2,0 φ = 2,38 φ = 2,8	20	Flamme plate	n ⁺ = 5 × 10 ⁷ n ⁺ = 1,2 × 10 ⁸ n ⁺ = 3 × 10 ⁹	[86]
C ₂ H ₂ /O ₂	20	Flamme plate u= 50 (cm/s)	n ⁺ = 7 × 10 ⁹	[87]
C ₂ H ₄ /N ₂ O φ=0,1	80-110	Flamme Plate T _F ~ 1750 K	n ⁺ = 1,2 × 10 ¹⁰	[88]
H ₂ /O ₂ /N ₂	760	Flamme plate T _F ~ 2550 K	n ⁺ =n ^e = 9 × 10 ⁸	[89, 90]
H ₂ /O ₂ /N ₂ +1 % C ₂ H ₂	760		n ⁺ = 2 × 10 ¹¹	[91]
H ₂ /O ₂ /N ₂ +1,8% CH ₄ /, φ=1,0	760	Flamme plate	n ⁺ = 1,8 × 10 ¹¹	[82]
CO/N ₂ O φ=0,5	760	Flamme plate T _F ~ 2645 K	n ⁺ = 6 × 10 ⁹	[92]

Tableau 2.1 – Valeurs de concentration ionique totale maximale pour quelques flammes étudiées dans la littérature.

maximales, mesurées dans les flammes d'hydrocarbures-air et d'hydrocarbures-oxygène brûlant à pression allant de 20 à 760 torr (1 torr \simeq 133,32 Pa), se situent dans la gamme 10^9 - 10^{11} (cm^{-3}). En général, les concentrations les plus élevées sont obtenues lorsque l'acétylène (C_2H_2) est utilisé comme carburant [8], ce qui justifie l'intérêt porté à cette molécule. Ainsi, la densité des ions atteint son maximum proche de la température adiabatique, dans la région où les concentrations des substances neutres responsables de la chimi-ionisation (CH et O) sont au maximum. Puis, elle diminue d'une manière significative dans la région des gaz brûlés.

Calcote et al. [84] ont mesuré la concentration ionique positive maximale pour des flammes d'acétylène/oxygène à une basse pression de 4 (torr) dans une gamme de richesses allant de 0,7 à 1,25. Ils ont constaté que la concentration maximale la plus élevée se produit à une richesse d'environ l'unité; et elle diminue d'une manière quasi-linéaire avec l'augmentation ou la diminution de la richesse de mélange.

Globalement, lorsque la flamme est enrichie avec du carburant, la concentration ionique totale diminue au premier abord. Delfau et al [85] ont rapporté, pour des flammes : $\text{C}_2\text{H}_2\text{-O}_2\text{-N}_2$ et $\text{C}_2\text{H}_4\text{-O}_2\text{-N}_2$ brûlant à une pression de 45 (torr), que la concentration totale des ions positifs décroît linéairement de 7×10^{10} (cm^{-3}) à 10^9 (cm^{-3}) lorsque la richesse est augmentée de 1,2 à 2,3. Ensuite, à partir d'une certaine richesse, la concentration ionique grandit avec l'enrichissement supplémentaire du mélange des réactifs. Cette augmentation a été attribuée à la production de particules chargées, en résultat d'un processus de thermo-ionisation, à partir des particules de suie présentes en de grandes concentrations dans les flammes très riches en carburant.

Nous avons vu que l'ion CHO^+ produit par un mécanisme de chimi-ionisation est le cation initial dans les flammes d'hydrocarbures pauvres et proches de la stœchiométrie. Toutefois, ce cation n'est pas l'ion dominant, puisqu'il est rapidement consommé par les réactions de transfert de charge (éq.2.4.16) formant ainsi d'autres ions positifs. Une très grande variété d'ions a été détectée; l'identification de ces ions positifs obtenus dans le cas des flammes stœchiométriques de méthane, de néopentane et d'acétylène brûlant sous pression atmosphérique a fait l'objet de nombreuses études. Pratiquement dans tous les cas, l'ion le plus abondant était l'ion H_3O^+ ; dans la flamme de méthane, par exemple, sa concentration correspond approximativement à 70% de la concentration totale des ions [79]. Selon les simulations numériques de Brown et Eraslan [68, 69] l'ion dominant dans les flammes pauvres d'acétylène est le $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^+$. Si la richesse s'approche de l'unité, le H_3O^+ devient l'espèce chargée dominante, et aux conditions riches du mélange, l'ion dominant est le C_3H_3^+ .

La détermination de la structure ionique des flammes de méthane/oxygène a fait l'objectif des travaux de Goodings et al. [70–72]. Ces expériences représentent l'une des études, s'inté-

2.4 Descriptif des propriétés ioniques des flammes

ressant à la formation et la composition ionique dans les flammes, les plus importantes. Deux richesses sont comparées : pauvre ($\phi=0,2$) et riche ($\phi=2$). Les profils des concentrations ioniques sont mesurés par spectrométrie de masse inférieure à 55 uma (unité de masse atomique unifiée) pour les cations et à 110 uma pour les anions. Dans le cas de la flamme riche, le maximum de la concentration totale des ions positifs était approximativement $4 \times 10^{+10}$ (cm^{-3}); et il était d'un facteur environ trois fois plus grand que celui caractérisant le cas de la flamme pauvre. Les cations H_3O^+ et C_3H_3^+ sont déterminés comme les ions prépondérants dans la flamme riche, tandis que dans la flamme pauvre ce sont les ions H_3O^+ et $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^+$ qui dominent.

Des profils ioniques expérimentaux, provenant du travail de Peeters et al. [82] pour une flamme méthane/oxygène stœchiométrique brûlant à pression atmosphérique, montrent également la domination du cation H_3O^+ qui se présente avec une concentration de $1,5 \times 10^{11}$ (cm^{-3}). Les autres cations importants présentent des concentrations maximales inférieures d'un facteur d'environ 100 pour $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}^+$ et C_3H_3^+ et d'environ 10^4 pour le CHO^+ par rapport à la concentration maximale du H_3O^+ .

2.4.2.2 Espèces chargées négatives :

Les espèces chargées négativement sont représentées par les électrons et les ions négatifs ($n^- = n^e + n^{anion}$). Il est assez difficile de déterminer leurs contributions respectives dans la concentration négative totale. En général, les électrons sont considérés comme les porteurs majoritaires de la charge négative dans les flammes [68, 69, 73–75, 77, 93]. Par conséquent, comme la flamme en absence d'un champ électrique extérieur est un milieu quasi-neutre électriquement, l'équation ($n^- \approx n^e \approx n^+$) est souvent adoptée.

Les résultats obtenus par les différentes études, s'intéressant aux ions négatifs dans des flammes, sont parfois contradictoires et aucune image complète et claire n'a encore pu apparaître. En effet, on peut noter des divergences considérables entre ces études à l'égard de l'identité et l'abondance relative des porteurs de charge négative trouvés. Calcote [84], en utilisant des sondes électriques, a déduit qu'environ 98% de la charge négative est présente sous forme d'ions négatifs. Cette conclusion a été appuyée par les travaux de Feugier et van Tiggelen [94] qui ont utilisé un spectromètre de masse. Toutefois, d'autres mesures réalisées également avec la spectrométrie de masse par Green et Sugden [91] et Calcote [84] indiquent qu'il y a seulement de très faibles concentrations d'ions négatifs; jusqu'à 99% de la charge négative étant transportée par les électrons libres. Ainsi, des études menées par Knewstubb [95], montrent une formation d'ions négatifs notable uniquement dans la zone de préchauffage; leur concentration diminue rapidement dans la zone de réaction, atteignant une valeur extrêmement faible dans

les produits. Ces dernières observations sont supportées par les auteurs des travaux [96, 97] qui ont mesuré une proportion importante de la concentration totale des électrons par rapport à celle des ions négatifs ($\times 100$), en aval de la zone de réaction.

En 1979, Goodings et al. [72] procéda à l'étude expérimentale la plus détaillée et la plus complète à ce jour sur les concentrations et l'identité des ions négatifs dans les flammes. Les mesures concernant les flammes méthane/oxygène brûlant à pression atmosphérique ont montré que les ions négatifs se présentent avec des concentrations comparables à celles des ions positifs, notamment en amont de la zone de réaction et plus particulièrement dans le cas de la flamme pauvre ($n_{max}^{anion} \approx (2/3)n_{max}^+$). De ce fait, les anions peuvent jouer un rôle crucial dans la structure ionique en modifiant les propriétés physiques du mélange gazeux tel que la conductivité électrique ou en changeant la distribution des cations via les réactions de recombinaison ion/ion. Dans le cas de la flamme pauvre, six anions dominants sont trouvés (OH^- , O^- , O_2^- , CHO_2^- , CO_3^- , CHO_3^-); et l'abondance relative de l'anion CO_3^- est nettement visible dans la région des gaz brûlés. Pour les flammes riches, les anions CHO_2^- , O_2^- et C_2H^- sont déterminés comme les anions les plus présents.

Il semble donc certain que des ions négatifs se produisent naturellement dans les flammes; d'évidentes preuves indiquent que leur formation est subordonnée à la production primaire d'électrons [8, 72]. En effet, la majorité des ions négatifs proviennent du processus d'attachement des électrons aux molécules neutres (éq.2.4.17). Il est important de conclure que la contribution des anions dans la diffusion ambipolaire étant considérable, il est essentiel de les inclure dans les modèles décrivant la chimie des ions dans les flammes.

2.4.3 Applications des propriétés ioniques des flammes

Il est communément admis que les concentrations des ions relativement faibles n'ont pas d'effet sur les mécanismes d'oxydation des combustibles; et leur inclusion ne fait que compliquer indûment les modèles chimiques. Cependant, malgré cette très faible concentration, la présence des ions dans les flammes peut avoir un intérêt considérable dans plusieurs applications de combustion.

Dans les années soixantes du siècle précédent, l'intérêt de l'ionisation dans le processus de combustion a été connecté principalement avec les problèmes de la présence des espèces chargées dans l'échappement des fusées, avec pour but l'atténuation des signaux radar [98], ainsi qu'avec le développement de convertisseurs d'énergie magnétohydrodynamique et les détecteurs à ionisation pour la chromatographie gazeuse [99]. Néanmoins, l'intérêt le plus important, qui par ailleurs justifie le nombre considérable d'expériences s'intéressant au sujet à l'époque, ve-

2.4 Descriptif des propriétés ioniques des flammes

nait du fait qu'on estimait (démenti depuis) que les ions contribuaient de manière notable au processus chimique de suies.

À l'heure actuelle, l'intérêt s'est tourné vers les enjeux écologiques de la combustion. L'utilisation des aspects électriques de la combustion se concentre essentiellement sur les effets pratiques de l'application de champs électriques aux ions des flammes pour assister la combustion dans toutes ses étapes : allumage, maintien de la combustion et traitement des polluants. Une présentation avec plus de détails des études s'intéressant à ces applications est réalisée dans le chapitre 4.

La réponse des espèces chargées présentes naturellement dans les flammes aux champs électriques peut facilement affecter la forme des flammes. L'amplitude des effets observés a même conduit les chercheurs à réfléchir à l'utilisation, dans l'avenir, de l'interaction entre les ions des flammes et les tirs de courant électrique pour remplacer l'eau dans l'extinction des incendies [6].

Chapitre 3

Notions générales sur les plasmas et les gaz ionisés

Sommaire

3.1 Définitions et phénomènes de base	46
3.1.1 Degré d'ionisation	46
3.1.2 Caractérisation thermique des plasmas	47
3.1.3 Méthodes de génération des plasmas	48
3.1.4 Caractérisation des flammes	49
3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé	50
3.2.1 Fonction de distribution et équation de Boltzmann	50
3.2.2 Force électrique : loi de Coulomb	52
3.2.3 Intensité et potentiel électriques : théorème de Gauss	53
3.2.4 Équations électro-hydrodynamiques	53
3.2.5 Transport des particules chargées	61
3.3 Propriétés de transport des particules chargées dans les gaz faiblement ionisés	62
3.3.1 Mobilité électrique	62
3.3.2 Diffusion libre	64
3.3.3 Diffusion ambipolaire	65

Le présent chapitre traite d'une manière très succincte le deuxième aspect important de cette thèse et qui porte sur les plasmas. Le terme « plasma » y est pris dans son sens large de gaz ionisé, néanmoins l'attention est ici mise sur les gaz faiblement ionisés dont les applications technologiques n'ont cessé de se diversifier depuis les premières études de décharges électriques

dans les gaz. La première section de ce chapitre est une introduction générale à quelques notions fondamentales des gaz ionisés. La section suivante établit les équations décrivant la dynamique des gaz faiblement ionisés, notamment lorsque ceux-ci sont en interaction avec un champ électrique ; l'objectif de cette section est de mettre en évidence la théorie permettant d'étudier la réponse des flammes aux champs électriques. Une description macroscopique des propriétés de transport des particules chargées, intervenant dans cette interaction, clôt le chapitre.

3.1 Définitions et phénomènes de base

Les plasmas constituent le quatrième état de la matière après les états solide, liquide et gazeux ; et représentent près de 99 % de l'Univers. On les trouve à l'état naturel d'une manière extrêmement répandue (couronne solaire, Soleil, intérieur des étoiles, éclairs, ionosphère, ...), mais aussi dans l'industrie et les nouvelles technologies telles que les téléviseurs, la propulsion, la fusion nucléaire, traitement des matériaux et de nombreuses autres applications qui sont encore en plein développement (amélioration de la combustion, contrôle des écoulements en proche des parois (recollement de couche limite) [100], traitement des déchets [101], stérilisation [102], etc...).

Les plasmas sont des gaz partiellement ou totalement ionisés globalement quasi-neutres électriquement (les charges positive et négative s'équilibrent). On dit qu'un gaz est ionisé dès qu'il contient une certaine proportion d'électrons et d'ions. En général, pour qu'un milieu ionisé soit considéré comme un plasma, il faut que son comportement ne puisse être décrit qu'en tenant compte des concentrations des espèces chargées qu'il contient. Néanmoins, parfois, « par abus de langage, on donne également le nom de plasma à tous les gaz ionisés quel que soit leur degré d'ionisation [103] ».

3.1.1 Degré d'ionisation

Le degré d'ionisation, qui est un paramètre souvent utilisé pour caractériser les plasmas et ses phénomènes, est défini par la quantité α :

$$\alpha = \frac{n^e}{n^n + n^e}$$

n^e et n^n : sont, respectivement, les densités¹ des électrons et des neutres dans le mélange gazeux.

1. Nombre de particules par unité de volume.

La valeur du degré d'ionisation dans les divers types de gaz ionisés varie depuis des valeurs très faibles de l'ordre 10^{-10} , par exemple, jusqu'à 1. Selon leur degré d'ionisation, les gaz ionisés sont classés en deux familles [104] :

- Gaz faiblement ionisés : $\alpha < 10^{-4}$ (couche basse de l'ionosphère, décharges électriques dans les gaz, flammes, propulseurs, etc...).
- Gaz fortement ionisés : $\alpha > 10^{-4}$ (couche haute de l'ionosphère, couronne solaire, étoiles, etc...).

3.1.2 Caractérisation thermique des plasmas

L'état cinétique des différentes espèces composant un gaz ionisé est caractérisé par les trois températures T_e , T_i et T , respectivement, température des électrons, des ions et des neutres. On se basant sur les valeurs relatives de ces températures, les plasmas sont classés généralement en deux grandes catégories dont le traitement et l'interprétation physique sont très différents : les plasmas thermiques et les plasmas non-thermiques.

3.1.2.1 Plasmas thermiques

Ces plasmas se trouvent dans un équilibre thermique ; autrement dit, toutes les particules (électrons et espèces lourdes) ont pratiquement la même quantité d'énergie ($T_i \simeq T_e$). On retrouve dans cette catégorie, par exemple, la partie centrale des arcs électriques.

3.1.2.2 Plasmas non-thermiques

Dans ces plasmas, l'énergie moyenne des électrons peut être de quelques électronvolts alors que les espèces lourdes restent à basse température. Par conséquent, l'équilibre thermique dans ce genre de plasma ne peut se produire ($T_i \ll T_e$), ce qui se traduit par l'appellation « hors-équilibre ». Le bon niveau de description de l'énergie des électrons est alors l'équation de Boltzman. Macroscopiquement, le système est à température ambiante ; il contient toutefois des électrons qui sont de haute énergie (température jusqu'à 10^5 °C). On retrouve dans cette catégorie : les décharges électriques basses pressions, les décharges nanosecondes, les lasers à gaz², etc... .

Les plasmas sont également parfois classés en plasmas chauds et plasmas froids. Les plasmas chauds, qui ne concernent pas ce travail, sont associés aux plasmas de fusion où l'énergie

2. Laser dans lequel le milieu excité est un gaz.

moyenne des particules est relativement très élevée. Cette catégorie concerne généralement les plasmas fortement ionisés. Par ailleurs, on regroupe sous le thème des plasmas froids les autres types de milieux plasmagènes. De façon générale, ce sont des milieux faiblement ionisés où le niveau de température est inférieur à quelques dizaines de milliers de degrés.

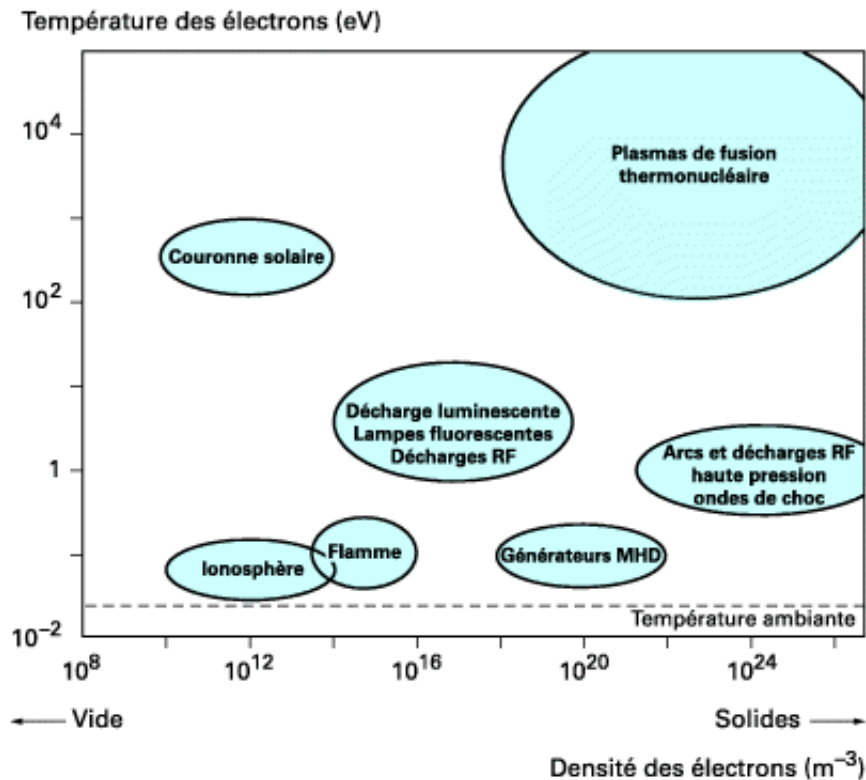


Figure 3.1 – Classification des plasmas que l’on peut rencontrer dans la nature et en laboratoire [105].

3.1.3 Méthodes de génération des plasmas

On peut générer un plasma principalement de deux manières :

3.1.3.1 De manière thermique

Lorsque l’on chauffe un gaz à une température suffisamment élevée (de l’ordre de 10^4 K), l’énergie moyenne ($\frac{3}{2}kT$) de translation de ses molécules peut devenir du même ordre que leur énergie d’ionisation ; dans ces conditions, lorsque deux molécules entrent en collision, il peut y avoir ionisation de l’une d’entre elles [106]. Cette énergie thermique apportée aux molécules

neutres peut être produite par plusieurs techniques, y compris : la focalisation de faisceaux laser, les ondes de choc, la fission³ ou la fusion nucléaires⁴.

3.1.3.2 De manière électrique

Les plasmas peuvent également être générés en faisant passer un courant électrique à travers un gaz (décharge électrique). Dans ce cas, l'énergie est apportée aux électrons libres présents en faible quantité dans les gaz (cas de l'air ambiant ou des flammes). Sous l'effet de cette énergie, les électrons libres s'accélèrent permettant l'ionisation de gaz. L'application d'un potentiel électrique à un gaz entre deux électrodes, à l'aide de sources haute-tension (générateur électrique), reste une méthode classique pour réaliser une décharge. Le type de plasma généré dépend de plusieurs paramètres, y compris : l'intensité du champ, la nature du gaz dans l'espace inter-électrodes, la géométrie et le matériau des électrodes.

Les décharges électriques génèrent majoritairement des plasmas froids faiblement ionisés qui sont largement utilisés pour assister la combustion. Les exemples les plus courants sont : *la décharge à barrière diélectrique* (DBD) : c'est une décharge couronne⁵ se produisant dans un système d'électrodes où une des électrode est recouverte par un diélectrique⁶, et *la décharge impulsionnelle nanoseconde répétitive* où les impulsions sont de très courtes durées (de l'ordre de quelques nanosecondes), ou encore *la décharge RF* (radio-fréquence). Pour davantage d'informations sur les décharges couramment utilisées dans les études de l'amélioration de la combustion par plasma, le lecteur pourra se référer à la revue [2].

3.1.4 Caractérisation des flammes

Comme vu précédemment, les plasmas sont usuellement caractérisés en fonction de la température des électrons : T_e (plasma chaud ou froid) et de la densité des électrons : n_e (plasma faiblement ou fortement ionisé). Ces valeurs pour une flamme sont habituellement de : $T_e \simeq T \simeq 0,1$ (eV) (on rappelle que $1 \text{ eV} = 1,602 \times 10^{-19}$ Joule et correspond à une température de 11600 K environ) et $n_e \simeq 10^{14} - 10^{17} \text{ (m}^{-3}\text{)}$. Quoique la dernière valeur soit relativement faible, le comportement des flammes, en présence de champs électriques extérieurs, ne peut être décrit sans

3. La fission nucléaire est le phénomène par lequel le noyau d'un atome lourd (noyau qui contient beaucoup de nucléons, tels les noyaux d'uranium et de plutonium) est divisé en plusieurs nucléides plus légers.

4. La fusion nucléaire est un processus où deux noyaux atomiques s'assemblent pour former un noyau plus lourd.

5. Une décharge couronne se produit lorsqu'un courant électrique se crée entre deux électrodes portées à un haut potentiel. Elle survient généralement entre une électrode de rayon de courbure faible (une pointe ou une arrête par exemple) et une autre de rayon de courbure important (une plaque métallique ou la terre).

6. Un matériau diélectrique est un milieu qui ne peut pas conduire le courant électrique (isolant électrique).

déterminer les densités des espèces chargées présentes. Conséquemment, on peut se permettre de classer les flammes, notamment lorsqu'elles sont soumises aux champs électriques, dans la catégorie des plasmas en équilibre thermique faiblement ionisés.

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

Dans le cas des gaz faiblement ionisés soumis aux champs électriques, quelques ions et électrons se déplacent au milieu des particules neutres dominant le gaz. Ce sont alors les collisions binaires entre une espèce chargée se déplaçant, sous l'effet du champ électrique, et une particule neutre qui déterminent la dynamique des particules ionisées. Dans cette section, nous nous proposons d'établir le modèle d'équations décrivant cette dynamique.

Pour quantifier les effets de champ électrique sur les gaz ionisés, différentes écritures à l'échelle macroscopique des équations de conservation sont proposées dans la littérature. On constate souvent des différences entre ces systèmes d'équations. Ces différences expliquent la difficulté d'établir les équations décrivant de tels milieux complexes en restant à l'échelle macroscopique. Donc, pour des études plus fines, il faut aller au-delà de l'approche macroscopique et tenir compte de la nature moléculaire de gaz en introduisant la théorie cinétique.

Classiquement les équations de conservation de la mécanique des fluides sont établies au niveau macroscopique en effectuant, dans un élément de volume élémentaire, le bilan des grandeurs, Φ , représentant la masse, la quantité de mouvement et l'énergie (cf. section 2.3.1.2). La théorie cinétique des gaz est utilisée afin de chercher à expliquer ce comportement macroscopique et de mettre en évidence les hypothèses introduites pour établir les équations de Navier-Stokes. Une telle démarche dite « microscopique » est également envisageable pour établir les équations macroscopiques classiques de conservation.

3.2.1 Fonction de distribution et équation de Boltzmann

En théorie cinétique des gaz, il suffit pour décrire complètement le système au niveau moléculaire de connaître la fonction de distribution des particules de chacune des espèces qui le constituent :

$$f_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t)$$

Cette fonction généralisée caractérise, à l'instant t , dans l'espace des phases (\vec{x}, \vec{u}_k) , la répartition des particules d'une espèce (k) donnée dans le milieu. L'espace des phases est défini comme

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

un espace à six dimensions : trois coordonnées spatiales des particules (\vec{x}) et trois composantes de leurs vitesses (\vec{u}_k).

La connaissance de la fonction de distribution constitue la clé de la description statistique du système, puisque les grandeurs macroscopiques peuvent se déduire de cette fonction. En effet, si $\Phi_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t)$ est une grandeur associée à une particule d'espèce k , son équivalent macroscopique sera la valeur moyenne :

$$\overline{\Phi}_k(\vec{x}, t) = \frac{1}{n_k(\vec{x}, t)} \int \Phi_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t) f_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t) d\vec{u}_k \quad (3.2.1)$$

La quantité $\Phi_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t)$ peut être la masse, la quantité de mouvement, l'énergie cinétique ou toute autre propriété caractéristique d'une particule. Ce peut être un scalaire, un vecteur, ou une quantité plus complexe. Le nombre moyen de particules d'une espèce par unité de volume $n_k(\vec{x}, t)$ au temps t est obtenu en intégrant la fonction de distribution dans l'espace des vitesses :

$$n_k(\vec{x}, t) = \int f_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t) d\vec{u}_k$$

Si l'on intègre $n_k(\vec{x}, \vec{u}_k)$ sur tout l'espace, on obtient le nombre N_k de particules d'espèce k présentes dans le milieu :

$$N_k = \int n_k(\vec{x}, t) d\vec{x}$$

Si toute propriété du système peut être calculée à partir de la fonction de distribution, il nous faut connaître l'évolution de celle-ci en fonction du temps. L'équation à laquelle satisfait cette évolution s'appelle l'équation de Boltzmann (1872). Cette équation est utilisée pour étudier comment un gaz transporte des quantités physiques comme la chaleur et la quantité de mouvement, et donc de dériver les propriétés de transport comme la viscosité et la conductivité thermique.

Soit un gaz placé dans un champ externe de force électrique $F(\vec{x}, t)$ (Supposons qu'on puisse négliger la force de gravité) ; l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$\frac{\partial f_k}{\partial t} + \vec{u}_k \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{x}} + \frac{F_k(\vec{x}, t)}{m_k} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{u}_k} = \sum_s J(f_k, f_s) \quad (3.2.2)$$

Le membre de droite de la dernière équation rend compte de l'effet des collisions⁷ d'une particule de l'espèce k avec les autres particules constituant le mélange gazeux. En réalité, les champs de

7. Une collision est un choc direct entre deux particules. Un tel impact transmet une partie de l'énergie de l'une des particules à la seconde. Ce transfert d'énergie peut être par exemple en chaleur, en déformation, ou encore par la création de nouvelles particules (réactions chimiques).

force F_k ne sont pas exclusivement externes, puisque il y a les interactions Coulombiennes entre les particules chargées comme on le verra à la section suivante. Par ailleurs, il existe des effets collectifs et notamment l'écrantage en dehors des sphères de Debye⁸. Ainsi, les interactions dans les sphères de Debye sont prises en compte par les collisions binaires avec des potentiels écrantés via les termes $J(f_k, f_s)$ et les interactions hors sphères de Debye sont prises en compte collectivement par le champ moyen E (éq.3.2.4) via les termes de forces F_k .

Enfin, il convient de noter que le cadre cinétique présenté ici correspond à un mélange de gaz monoatomiques. En d'autres termes, les aspects polyatomiques ne sont pas pris en compte dans cette section.

Donc, « L'équation de Boltzmann décrit l'évolution de la fonction de distribution sur un intervalle de temps intermédiaire entre la durée d'une collision et le temps de relaxation vers un équilibre local. Cette étape cinétique de l'évolution est suivie d'une étape hydrodynamique mettant en jeu des intervalles de temps très supérieurs au temps de relaxation. Le gaz est alors proche d'un état d'équilibre local décrit par un nombre réduit de variables locales moyennes pertinentes telles que la densité, la vitesse et la température [107] ». L'évolution de ces variables est régie par les équations hydrodynamiques qu'il est possible de déduire de l'équation de Boltzmann comme nous allons voir par la suite (cf. section 3.2.4). Mais, tout d'abord, essayons de donner une relation explicite de la force électrique, $F(\vec{x}, t)$, agissant sur le gaz.

3.2.2 Force électrique : loi de Coulomb

En présence d'un champ électrique, une force électrique s'exerçant sur les molécules chargées doit être considérée. La formulation de cette force peut être déterminée par la loi expérimentale de Coulomb (1785) : elle décrit la force de l'interaction électrique entre deux particules mobiles et chargées électriquement, k et s , de la façon suivante :

$$\vec{F}_{ks} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_k q_s}{r_{ks}^2} \vec{r}_{k \rightarrow s} \quad (3.2.3)$$

où q_k et q_s les charges électriques, r_{ks} distance entre les deux particules k et s , et $\vec{r}_{k \rightarrow s}$ le vecteur unitaire orienté de k vers s défini par : $\vec{r}_{k \rightarrow s} = \frac{\vec{ks}}{r_{ks}}$

La force électrique résultante, s'exerçant sur n'importe quelle particule chargée, est égale à la somme vectorielle des force exercées par les diverses autres molécules chargées du système

8. La longueur de Debye est la distance au delà de laquelle une séparation significative des charges peut avoir lieu ; elle est définie par la relation : $\lambda_{D_e} = \left(\frac{\epsilon_0 K T_e}{n e^2} \right)^{1/2}$.

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

(principe de superposition) :

$$\vec{F}_k = \sum_s \vec{F}_{ks} = \frac{q_k}{4\pi\epsilon_0} \sum_s \frac{q_s}{r_{ks}^2} \vec{r}_{k \rightarrow s}$$

On a par définition du vecteur de l'intensité de champ électrique produit par un groupe de charges (à l'exception de la charge q_k) :

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_s \frac{q_s}{r_{ks}^2} \vec{r}_{k \rightarrow s} \quad (3.2.4)$$

Ce qui donne alors :

$$\vec{F}_k = q_k \vec{E} \quad (3.2.5)$$

3.2.3 Intensité et potentiel électriques : théorème de Gauss

En électrostatique, pour obtenir une équation décrivant l'intensité locale du champ électrique, on utilise le théorème de flux-divergence appelé aussi théorème de Gauss. Il peut s'énoncer ainsi : le flux du champ \vec{E} à travers une surface fermée est proportionnel à la charge contenue dans le volume délimité par cette surface ; mathématiquement on a :

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho_V}{\epsilon_0} \quad (3.2.6)$$

Avec : $\rho_V = \sum_k q_k n_k$ représente la densité volumique de charge.

L'équation de Poisson décrivant la répartition de potentiel électrique, V , est dérivée de la relation précédente pour donner une relation entre la distribution locale de la charge et le potentiel :

$$-\operatorname{div} \vec{E} = \Delta V = -\frac{\rho_V}{\epsilon_0} \quad (3.2.7)$$

Le calcul de la force et de l'intensité électriques ne se fait alors que lorsque l'on connaît la répartition de potentiel électrique, qui est principalement déterminée par la distribution de l'ensemble des particules chargées intervenant dans le système. Il est donc nécessaire d'établir des équations macroscopiques pour décrire le transport de l'ensemble de ces particules chargées (cf. section 3.2.5).

3.2.4 Équations électro-hydrodynamiques

Comme dit précédemment, à partir de l'équation de Boltzmann (éq.3.2.2), il est possible d'établir des équations de bilan local relatives aux quantités conservées lors d'une collision.

Ces équations font intervenir des moyennes calculées à l'aide de la fonction de distribution (éq. 3.2.1); et leurs solutions permettent d'avoir les fonctions des caractéristiques macroscopiques de l'écoulement.

Le but est donc de trouver l'équation de l'évolution de la valeur moyenne, prise sur l'espace des vitesses, de la variable Φ . Pour obtenir l'équation recherchée, l'équation de Boltzmann est multipliée par $\Phi_k(\vec{x}, \vec{u}_k, t)$ et intégrée sur tout l'espace des vitesses; on obtient :

$$\int \frac{\partial f_k}{\partial t} \Phi_k d\vec{u}_k + \int \vec{u}_k \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{x}} \Phi_k d\vec{u}_k + \int \frac{F_k(\vec{x}, t)}{m_k} \cdot \frac{\partial f_k}{\partial \vec{u}_k} \Phi_k d\vec{u}_k = \int \Phi_k \sum_s J(f_k, f_s) d\vec{u}_k \quad (3.2.8)$$

En introduisant la moyenne de la quantité Φ , et en utilisant le principe d'intégration par partie, l'équation 3.2.8 devient :

$$\frac{\partial n_k \overline{\Phi_k}}{\partial t} - n_k \frac{\partial \overline{\Phi_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \vec{x}} (n_k \overline{\vec{u}_k \Phi_k}) - n_k \overline{\vec{u}_k} \cdot \frac{\partial \overline{\Phi_k}}{\partial \vec{x}} - n_k \frac{\overline{F_k}}{m_k} \cdot \frac{\partial \overline{\Phi_k}}{\partial \vec{u}_k} = \sum_s \Delta_{ks}[\Phi_k] \quad (3.2.9)$$

La quantité $\Delta_{ks}[\Phi_k]$ représente la variation de la quantité Φ_k au cours de la collision de deux particules (k et s).

Lorsque Φ est fonction seulement de \vec{u} (mais non de \vec{x} ni de t), l'équation de transport 3.2.9 s'écrit plus simplement :

$$\frac{\partial n_k \overline{\Phi_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (n_k \overline{u_{ki} \Phi_k}) - n_k \frac{\overline{F_k}}{m_k} \cdot \frac{\partial \overline{\Phi_k}}{\partial u_{ki}} = \sum_s \Delta_{ks}[\Phi_k] \quad (3.2.10)$$

En présence d'un champ électrique, deux approches différentes peuvent être distinguées pour décrire la dynamique du gaz :

3.2.4.1 Approche classique

Classiquement, en mécanique des fluides, toutes les particules présentes dans le gaz sont considérées comme se déplaçant à une seule vitesse moyenne. Lorsque le milieu est soumis à un faible champ électrique, il est légitime également de considérer que les particules chargées peuvent être considérées comme se déplaçant à la même vitesse barycentrique que les neutres, définie ainsi :

$$\vec{u} = \frac{1}{\rho} \sum_k \rho_k \overline{\vec{u}_k} \quad \text{avec :} \quad \rho = \sum_k \rho_k = \sum_k n_k m_k$$

Ici ρ_k ($= \rho Y_k$) dénote la concentration (densité) massique (kg/m^3) de l'espèce k .

Pour différencier la vitesse d'une particule par rapport à la vitesse barycentrique du fluide, il

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

est commode d'introduire la vitesse de diffusion de cette espèce dans le mélange ; elle représente la vitesse de l'espèce par rapport à la vitesse moyenne du mélange \vec{u} :

$$\vec{V}_k = \vec{u}_k - \vec{u}$$

L'équation 3.2.10 peut alors s'écrire :

$$\frac{\partial n_k \overline{\Phi}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (n_k \overline{(u_i + V_{ki}) \Phi_k}) - n_k \frac{\overline{F_k}}{m_k} \frac{\partial \overline{\Phi}_k}{\partial (u_i + V_{ki})} = \sum_s \Delta_{ks} [\Phi_k] \quad (3.2.11)$$

À partir de la dernière équation on peut déduire des équations de bilan local pour chacun des invariants collisionnels. Il s'agit de la masse, des trois composantes de la quantité de mouvement et de l'énergie :

Conservation de masse

Nous allons appliquer l'équation 3.2.11 au cas où $\Phi_k = m_k$. Puisque m_k est une constante, on a alors :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_k \overline{(u_i + V_{ki})}) = \sum_s \Delta_{ks} [m_k]$$

Le terme de droite de cette équation représente la variation de masse de l'espèce k par collisions. Par principe de conservation de masse on a :

$$\sum_k \left(\sum_s \Delta_{ks} [m_k] \right) = 0$$

Par définition on a également :

$$\sum_k \rho_k \overline{V_{ki}} = 0$$

En sommant sur toutes les espèces du milieu, on obtient alors l'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.2.12)$$

Conservation de quantité de mouvement

Si maintenant nous prenons pour Φ_k une composante de la quantité de mouvement : ($\Phi_k = m_k u_{ki}$), l'équation 3.2.11 devient :

$$\frac{\partial \rho_k (u_i + \overline{V_{ki}})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_k (u_i u_j + 2u_i \overline{V_{kj}} + \overline{V_{ki} V_{kj}}) \right] - \rho_k \frac{F_k}{m_k} = \sum_s \Delta_{ks} [m_k (u_i + V_{ki})]$$

Le terme $\sum_s \Delta_{ks} [m_k (u_i + V_{ki})]$ représente l'échange de quantité de mouvement par collisions de la particule de l'espèce k avec les autres particules de milieu. On constate l'apparition du terme $\rho_k \overline{V_{ki} V_{kj}}$: c'est le flux de quantité de mouvement de l'espèce k à travers une surface se déplaçant à la vitesse \vec{u} ; il présente par définition le tenseur de pression défini ainsi :

$$p_{ij} = \sum_k p_{kij} = \sum_k \rho_k \overline{V_{ki} V_{kj}}$$

Par principe de conservation de quantité de mouvement on a :

$$\sum_k \left(\sum_s \Delta_{ks} [m_k (u_i + V_{ki})] \right) = 0$$

Alors, en sommant sur toutes les espèces et en remplaçant par l'expression de la force électrique établie par la loi de Coulomb (éq.3.2.5), on obtient l'équation globale de conservation de quantité de mouvement en présence du champ électrique :

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial p_{ij}}{\partial x_j} - \sum_k n_k q_k E_i = 0 \quad (3.2.13)$$

Conservation d'énergie

L'énergie totale d'une particule de milieu s'exprime : $e_{tk} = \frac{1}{2} u_k^2 + \epsilon_k$ où ϵ_k est l'énergie de formation de l'espèce k . En mettant $\Phi_k = m_k e_{tk}$, on a alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_k e_{tk})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_k u_j e_{tk})}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_i} \rho_k \left[u^2 \overline{V_{ki}} + 2u_j \overline{V_{kj} V_{ki}} + \overline{V_k^2 V_{ki}} \right] \\ + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho_k \epsilon_k \overline{V_{ki}} \right] - \rho_k \frac{F_{ki}}{m_k} (u_i + \overline{V_{ki}}) = \sum_s \Delta_{ks} [m_k e_{tk}] \end{aligned}$$

En faisant la somme sur toutes les espèces, on obtient l'équation de conservation de l'énergie

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

totale du gaz ($e_t = \sum_k Y_k e_{tk}$) en présence du champ électrique :

$$\frac{\partial(\rho e_t)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e_t)}{\partial x_j} + \frac{\partial(p_{ij} u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial J_i}{\partial x_i} - \sum_k n_k q_k E_i (u_i + \overline{V_{ki}}) = \dot{Q}_c \quad (3.2.14)$$

$\dot{Q}_c = \sum_k \sum_s \Delta_{ks} [m_k e_{tk}]$ représente la variation de l'énergie par collisions des espèces (par exemple les réactions chimiques). L'équation de transport de l'énergie fait intervenir le terme $J_i = \sum_k \left(\frac{1}{2} \rho_k \overline{V_k^2 V_{ki}} + \rho_k \epsilon_k \overline{V_{ki}} \right)$; il représente le flux d'énergie des espèces.

Les équations 3.2.12, 3.2.13 et 3.2.14 doivent être complétées par la détermination du tenseur des pressions (p_{ij}) et du flux d'énergie (J_i). Ces quantités s'expriment comme des valeurs moyennes qui doivent être calculées à partir de la fonction de distribution représentant la solution de l'équation de Boltzmann :

$$p_{ij} = \sum_k p_{kij} = \sum_k m_k \int f_k V_{ki} V_{kj} d\vec{u}_k$$

$$J_i = \sum_k \left(\frac{1}{2} \rho_k \overline{V_k^2 V_{ki}} + \rho_k \epsilon_k \overline{V_{ki}} \right) = \sum_k m_k \int \left(\frac{1}{2} f_k V_k^2 V_{ki} + f_k \epsilon_k V_{ki} \right) d\vec{u}_k$$

Une forme pertinente de la fonction de distribution doit donc être déterminée afin d'en déduire p_{ij} et J_i . Pour cela, on peut mettre en œuvre une procédure de développement proposée par S. Chapman et D. Enskog en 1917. L'idée de cette méthode est d'utiliser successivement deux ordres d'approximation pour exprimer la distribution des vitesses des particules :

$$f_k = f_k^0 + f_k^1 \quad \text{avec} \quad f_k^1 \ll f_k^0$$

A l'ordre zéro, la fonction de distribution est assimilée à une distribution de Maxwell-Boltzmann :

$$f_k^0 = n_k \left(\frac{m_k}{2\pi KT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m_k V_k^2}{KT} \right)$$

Lorsque l'on remplace f_k par f_k^0 , on obtient les équations classiques d'Euler sans terme de transport. Le terme associé au deuxième ordre d'approximation (qui conduit aux équations de Navier-Stokes) se réfère à une déviation, ψ , de la fonction de distribution maxwellienne par rapport à l'état d'équilibre :

$$f_k^1 = \psi f_k^0$$

Cette déviation présente la solution de l'équation suivante :

$$\frac{\partial f_k^0}{\partial t} + \vec{u}_k \cdot \frac{\partial f_k^0}{\partial \vec{x}_k} + \frac{F_k(\vec{x}, t)}{m_k} \cdot \frac{\partial f_k^0}{\partial \vec{u}_k} = \sum_s [J(f_k^0, \psi f_s^0) + J(\psi f_k^0, f_s^0)] \quad (3.2.15)$$

et sa détermination permet d'obtenir les fonctions des propriétés de transport, intervenant dans les équations de Navier-Stokes, associées au tenseur de pression et au flux de chaleur telles que la viscosité et la conductivité thermique. Une description détaillée de cette procédure se trouve dans les ouvrages [108–110].

3.2.4.2 Remise en question de l'approche classique

Dans le cas d'un fort champ électrique, le mouvement des espèces chargées, en particulier les électrons, est fortement contrôlé par les forces électriques. Dans ce contexte, supposer que la vitesse des espèces chargées est proche de la vitesse barycentrique de l'écoulement du gaz apparaît inexact. Il faut donc considérer séparément les vitesses barycentriques des particules chargées et les vitesses des particules neutres. L'état statique du gaz soumis au champ électrique se trouve alors représenté par trois équations de Boltzmann couplées décrivant l'évolution des fonctions de distribution : $f_n(\vec{x}, \vec{u}_n, t)$, $f_{el}(\vec{x}, \vec{u}_{el}, t)$ et $f_{ion}(\vec{x}, \vec{u}_{ion}, t)$ relatives, respectivement, aux molécules neutres, aux électrons et aux ions [111–113] :

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} + \vec{u}_n \cdot \frac{\partial f_n}{\partial \vec{x}} = J(f_n, f_n) + J(f_n, f_{el}) + J(f_n, f_{ion})$$

$$\frac{\partial f_{el}}{\partial t} + \vec{u}_{el} \cdot \frac{\partial f_{el}}{\partial \vec{x}} + \frac{F_{el}}{m_e} \cdot \frac{\partial f_{el}}{\partial \vec{u}_{el}} = J(f_{el}, f_n) + J(f_{el}, f_{el}) + J(f_{el}, f_{ion})$$

$$\frac{\partial f_{ion}}{\partial t} + \vec{u}_{ion} \cdot \frac{\partial f_{ion}}{\partial \vec{x}} + \frac{F_{ion}}{m_{ion}} \cdot \frac{\partial f_{ion}}{\partial \vec{u}_{ion}} = J(f_{ion}, f_n) + J(f_{ion}, f_{el}) + J(f_{ion}, f_{ion})$$

Dans ces équations, les termes : $J(f_{el}, f_n)$, $J(f_{el}, f_{el})$ et $J(f_{el}, f_{ion})$, par exemple, représentent l'action sur les électrons des collisions avec les autres électrons, les ions et les molécules neutres.

Selon cet abord, le formalisme précédent peut être maintenu pour les espèces neutres. La fonction de distribution considérée à l'approximation Maxwellienne d'ordre zéro s'écrit de la manière suivante :

$$f_n^0 = n_n \left(\frac{m_n}{2\pi KT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m_n (\vec{u}_n - \vec{u}^0)^2}{KT} \right)$$

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

où \vec{u}^0 est la vitesse barycentrique des espèces neutres et non plus celle du mélange + espèces chargées comme dans l'approche classique.

Pour les ions et les électrons, on fait un développement autour de leur vitesse moyenne respective comme dans le cas d'un gaz simple. On a alors :

$$f_e^0 = n_e \left(\frac{m_e}{2\pi KT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m_e (\vec{u}_e - \vec{u}_e^0)^2}{KT} \right)$$

$$f_{ion}^0 = n_{ion} \left(\frac{m_{ion}}{2\pi KT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{m_{ion} (\vec{u}_{ion} - \vec{u}_{ion}^0)^2}{KT} \right)$$

Il est aussi possible, dans ce cas, de permettre aux électrons d'avoir leur propre température, mais cela n'induit pas de modification remarquable dans les développements.

Il en résulte les équations de quantité de mouvement suivantes [114, 115] :

Chaque espèce neutre (n) :

$$\frac{\partial \rho_n (u_i^0 + \overline{V_{ni}})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_n (u_i^0 u_j^0 + 2u_i^0 \overline{V_{nj}} + \overline{V_{ni} V_{nj}}) \right] = P_{n,el} + P_{n,ion} + P_{n,n} \quad (3.2.16)$$

Électrons :

$$\frac{\partial \rho_{el} u_{el,i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_{el} (u_{el,i} u_{el,j} + \overline{V_{el,i} V_{el,j}}) \right] - \rho_{el} \frac{F_{el}}{m_{el}} = P_{el,el} + P_{el,ion} + P_{el,n} \quad (3.2.17)$$

Ions :

$$\frac{\partial \rho_{ion} u_{ion,i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho_{ion} (u_{ion,i} u_{ion,j} + \overline{V_{ion,i} V_{ion,j}}) \right] - \rho_{ion} \frac{F_{ion}}{m_{ion}} = P_{ion,el} + P_{ion,ion} + P_{ion,n} \quad (3.2.18)$$

Les termes $P_{k,s}$ quantifient l'échange de quantité de mouvement de groupe des particules de type k avec les particules d'espèce s , qui résulte des interactions élastiques et inélastiques. On remarque que les termes de vitesse de diffusion (\vec{V}_k) disparaissent de l'écriture des équations des électrons et des ions, puisque :

$$\vec{V}_k = \frac{1}{n_k} \int (\vec{u}_k - \vec{u}_k^0) f_k d\vec{u}_k = 0$$

Chapitre 3. Notions générales sur les plasmas et les gaz ionisés

Il faut noter que le tenseur de pression des espèces du type k , $\rho_k \overline{V_{ki} V_{kj}}$, n'a pas ici le même sens que dans le cas précédent (approche classique), puisque il représente le flux de quantité de mouvement à travers une surface se déplaçant à la vitesse d'ensemble de l'espèce de type k , alors que, dans la première approche, la surface de référence se déplace à la vitesse barycentrique du mélange de gaz.

Si l'on somme maintenant l'équation de conservation de moment (éq. 3.2.16) sur toutes les espèces neutres, et après quelques manipulations et approximations en utilisant le système d'équations couplées (Eqs. 3.2.16, 3.2.17 et 3.2.18) (pour une description plus détaillée de cette procédure, voir les travaux [114, 115]), on peut obtenir :

$$\frac{\partial \rho^0 u_i^0}{\partial t} + \frac{\partial (\rho^0 u_i^0 u_j^0)}{\partial x_j} + \frac{\partial p_{ij}^0}{\partial x_j} = \sum_{k=ions,el} (n_k q_k E_i) - \sum_{k=ions,el} (u_{kE,i} \dot{\omega}_k) \quad (3.2.19)$$

$\dot{\omega}_k (= \sum_s \Delta_{ks} [m_k])$ est le taux de production ou disparition des particules chargées d'espèce k .

En présence de champ électrique, la vitesse barycentrique des particules chargée d'espèce k peut être donnée par la somme vectorielle : $\vec{u} + \vec{u}_{kE}$, où $\vec{u}_{kE} = S_k \kappa_k \vec{E}$ ($S_k = +1$ ou -1 selon que k est chargée positivement ou négativement) est la vitesse causée par le champ électrique ; κ étant la mobilité électrique (cf. section 3.3.1). L'équation 3.2.19 devient alors :

$$\frac{\partial \rho^0 u_i^0}{\partial t} + \frac{\partial (\rho^0 u_i^0 u_j^0)}{\partial x_j} + \frac{\partial p_{ij}^0}{\partial x_j} = \sum_{k=ions,el} (n_k q_k E_i) - \sum_{k=ions,el} [(S_k \kappa_k E_i) \dot{\omega}_k] \quad (3.2.20)$$

En conclusion, et en comparaison avec la première approche classique (éq. 3.2.13), on voit apparaître particulièrement un terme de force supplémentaire qui n'est effectif que dans les régions de création ou de disparition d'espèces chargées. L'apparition de ce terme est due à la différentiation de la vitesse barycentrique des espèces neutres à celle des ions et des électrons. Ce terme de force supplémentaire est directement proportionnel au taux de production des espèces chargées et à leurs mobilités ainsi qu'à l'intensité de champ électrique. Dans le cas des gaz faiblement ionisés où les termes sources des particules chargées sont, généralement, très faibles (de l'ordre 10^{-5} ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$) pour les ions positifs dans les flammes par exemple), c'est alors l'intensité électrique qui est représentative de la portée de ce terme. Comme dans ce travail on s'intéresse à un milieu faiblement ionisé (flamme) soumis à un faible champ électrique, ce terme peut donc être négligé.

Par ailleurs, lorsqu'un fort champ électrique est appliqué, la température des espèces chargées, en particulier celles des électrons, devient très différente de la température moyenne du milieu. Tenant compte de ce qui vient d'être dit, et en procédant de la même manière que pour la quantité de mouvement, une équation très lourde de l'énergie totale du milieu, soumis à un

3.2 Équations décrivant l'action d'un champ électrique sur un gaz faiblement ionisé

fort champ électrique, peut être également établie. On y voit apparaître, notamment, un terme source de dégagement de la chaleur dû au mouvement intense des électrons très chauds qui cèdent une partie de leur énergie aux molécules neutres.

En effet, si un champ électrique important est créé dans un gaz faiblement ionisé, il en résulte un courant électrique dont la valeur est limitée par les collisions électron-neutre. Ces collisions transforment l'énergie fournie par le champ électrique en énergie désordonnée des électrons conduisant à un échauffement permanent du gaz d'électrons : c'est l'effet Joule. Le déplacement désordonné de l'ensemble des électrons dans le gaz va faire vibrer les particules qui le constituent ; plus ces particules vibrent plus la température du milieu augmente. Cet effet se produit dans tous les conducteurs, mais souvent le dégagement de chaleur ne peut être senti que lorsque l'intensité du courant est très grande.

3.2.5 Transport des particules chargées

De ce qui précède, on conclut aisément la nécessité de déterminer la distribution des particules chargées constituant le gaz ionisé pour pouvoir étudier sa dynamique en présence du champ électrique. Ceci peut être réalisé en remplaçant $\bar{\Phi}$ par m_k dans l'équation 3.2.11, établie précédemment, qui devient :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{u}_i \rho_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{V}_{ki} \rho_k) = \dot{\omega}_k \quad (3.2.21)$$

Le terme $\dot{\omega}_k$ représente la variation de la masse de l'espèce k par collisions (réactions chimiques par exemple). Par définition c'est le terme source de l'espèce k .

La vitesse de diffusion d'une particule k soumise à des forces s'écrit :

$$\bar{V}_k = - \sum_s D_{ks} d_s$$

où D_{ks} sont les coefficients de diffusion multiespèces (avec $\sum_k \rho_k D_{ks} = 0$) et d_s les vecteurs d'orientation de la diffusion.

En notant z_k la charge par unité de masse de l'espèce k , on trouve en négligeant la barodiffusion (un type de diffusion qui se produit quand il existe un gradient de pression) :

$$\bar{V}_k = - \sum_s D_{ks} \left(\nabla X_s - \rho_s z_s \frac{E}{p} \right) = - \sum_s (D_{ks} \nabla X_s) + \alpha_k E$$

Les coefficients α_k satisfont à la contrainte $\sum_k \rho_k \alpha_k = 0$ et la masse est bien conservée. On peut alors pour simplifier approcher la matrice de diffusion par une matrice diagonale et regrouper toutes les corrections pour la masse d'ensemble et on retrouve à partir de l'équation (3.2.21) :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial (u_i + V_i^C) \rho Y_k}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial (S_k \kappa_k E_i \rho Y_k)}{\partial x_i} = \dot{\omega}_k \quad (3.2.22)$$

\vec{V}^c représente la vitesse de correction qui est calculée pour assurer la conservation de masse globale, et a un terme de la forme : $-\sum_k \rho Y_k S_k \kappa_k E$.

L'équation (3.2.22) fait apparaître les termes de transport par diffusion des espèces, D_k , et par mobilité électrique, κ_k . Elle n'a donc de sens que si ces deux dernières quantités sont déterminées.

3.3 Propriétés de transport des particules chargées dans les gaz faiblement ionisés

Dans cette section, nous allons nous intéresser, dans le cadre d'une analyse macroscopique, à la définition et l'évaluation des coefficients de transport des espèces chargées dans les gaz faiblement ionisés apparus dans l'équation établie dans la section précédente, à savoir la mobilité et la diffusion des électrons et des ions.

3.3.1 Mobilité électrique

La mobilité électrique est définie comme la capacité de la particule chargée à se déplacer dans un milieu en réponse à un champ électrique ; l'unité appropriée est donc ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$). Se présentant comme un paramètre fondamental pour étudier et analyser l'effet du champ électrique sur la cinétique des gaz ionisés, elle relie la vitesse moyenne avec laquelle l'espèce chargée traverse le gaz (vitesse de dérive), ν_d , au champ électrique qu'elle rencontre via la relation :

$$\nu_{d_{kj}} = \kappa_{kj} E \quad (3.3.23)$$

où :

$$\kappa_{kj} = \frac{q_k}{m_k \bar{z}_{kj}} \quad (3.3.24)$$

3.3 Propriétés de transport des particules chargées dans les gaz faiblement ionisés

\bar{z}_{kj} dénote la fréquence de collision⁹ de la particule chargée k avec la particule j . Elle est calculée en fonction de la section efficace de transfert de quantité de mouvement espèces chargée/molécule en utilisant la théorie cinétique [106, 112].

La mobilité d'une particule chargée dans un mélange gazeux peut être approximée par la loi de Blanc [116] :

$$\kappa_k = \left(\sum_j \frac{X_j}{\kappa_{kj}} \right)^{-1} \quad (3.3.25)$$

Avec κ_{kj} la mobilité électrique des particules chargées de l'espèce k dans le gaz d'espèce j (mobilité binaire).

3.3.1.1 Électrons

Les informations concernant les valeurs de mobilité binaire électronique dans les gaz purs sont relativement limitées dans la littérature. Cependant, la base théorique pour calculer les coefficients de diffusion des électrons à partir des données collisionnelles en utilisant la théorie cinétique est bien établie [106, 112, 117, 118]; donc, les propriétés de transport électroniques dans de nombreux mélanges gazeux peuvent être calculées à condition que les données collisionnelles soient disponibles. De larges collections et des revues critiques des données expérimentales et théoriques, sur les sections efficaces de collision des électrons avec de nombreux atomes et molécules neutres et quelques ions positifs, en fonction de l'énergie électronique peuvent être trouvées dans les tables [119–125].

De façon générale, la mobilité électronique varie avec l'intensité du champ électrique, la densité et la température des molécules. Elle obéit à une loi générale de similitude prenant la forme suivante [106, 112] :

$$\kappa_e = \frac{1}{n} f \left(\frac{E}{n}, T \right)$$

La raison pour laquelle la mobilité des électrons dépend du champ électrique est que lorsque l'intensité de ce dernier varie, la fonction de distribution des vitesses des électrons, en particulier leur température, change ; et qu'il en résulte une modification de la fréquence de collision.

La vitesse de dérive, ν_d , des électrons est fonction de l'intensité de champ réduit (E/n) ; pour les faibles valeurs de celui-ci, elle y est proportionnelle ; par contre, aux valeurs plus importantes la relation de proportionnalité n'est plus valable, puisque la vitesse de dérive augmente plus rapidement que la relation linéaire. Tenant compte de ces dernières remarques, et du fait que les variations de la mobilité des électrons avec l'intensité de champ électrique réduit peuvent

9. La fréquence de collision est le nombre moyen de collisions entre les molécules par unité de temps.

être liées aux variations de la vitesse de dérive (éq.3.3.23), on peut conclure que la mobilité des électrons se déplaçant dans un gaz, soumis à un champ électrique qui tend vers zéro, ne dépend que de la densité des molécules composant ce gaz. En conséquence, la mobilité électronique est pratiquement constante dans un milieu où la densité totale de toutes les molécules varie peu localement (cas de l'air ambiant par exemple).

3.3.1.2 Ions

En ce qui concerne les mobilités ioniques, on a comme pour les mobilités électroniques une loi générale de variation :

$$\kappa_i = \frac{1}{n} f\left(\frac{E}{n}, T\right)$$

Néanmoins, la dépendance de la mobilité ionique avec le champ réduit est moins prononcée que celle des électrons. Cela tient au fait que l'échange d'énergie avec les neutres est beaucoup plus facile pour les ions que pour les électrons [112], de sorte que la température ionique reste voisine de la température moyenne du mélange pour une large gamme de valeurs de champ réduit. La mobilité des ions reste donc constante sur un grand palier du rapport (E/n) ; et elle commence à varier lorsque les ions atteignent une vitesse de dérive comparable à celle de l'agitation des molécules composant le gaz.

Des valeurs de la mobilité binaire des ions dans des gaz purs peuvent être trouvées dans les tables [126–129]. Cette série de travaux, composée de quatre parties, présente une base de données importante des propriétés de transport des ions gazeux dans une large plage de champ électrique réduit. Elle contient des données expérimentales sur les mobilités et les coefficients de diffusion de nombreux ions diffusant dans des gaz neutres de températures différentes, et soumis à des champs électriques externes. Néanmoins, ces données restent limitées à quelques ions dans quelques gaz purs dont la plupart ne présente pas des molécules majoritaires dans les flammes. Ainsi, les coefficients de transport de n'importe quel ion parmi ceux étudiés sont mesurés pour une seule température différente d'un gaz à un autre; subséquemment, des conclusions sur l'effet de la température sur la mobilité ne peuvent être retirées.

3.3.2 Diffusion libre

De la même façon que les neutres, la diffusion moléculaire des espèces chargées peut être décrite par la loi de Fick :

$$\vec{J}_{Dk} = \vec{V}_k n_k = -D_k \cdot \vec{\nabla} n_k \quad (3.3.26)$$

3.3 Propriétés de transport des particules chargées dans les gaz faiblement ionisés

où : $D_k = \left(\sum_j \frac{X_j}{D_{kj}} \right)^{-1}$ et

$$D_{kj} = \frac{KT_k}{m_k \bar{z}_{kj}} \quad (3.3.27)$$

La théorie cinétique permet d'expliciter la fréquence moyenne de collision \bar{z}_{kj} , qui figure dans cette formule, en fonction des sections efficaces de collision. En formant le rapport des deux formules 3.3.27 et 3.3.24, on obtient entre les deux principaux coefficients de transport la formulation :

$$D_{kj} = \kappa_{kj} \frac{KT_k}{q_k} \quad (3.3.28)$$

Cette relation, qui ne contient plus le terme de la fréquence de collision, est connue sous le nom de : « relation d'Einstein ». Elle n'est en général qu'approchée, parce qu'a priori les valeurs effectives de la fréquence de collision qui figurent dans les formules 3.3.27 et 3.3.24 sont différentes. Toutefois, elle reste valable dans les milieux faiblement ionisés et aux valeurs du rapport (E/n) relativement modérées où la diffusion des particules chargées se produit de façon uniforme dans toutes les directions [130].

3.3.3 Diffusion ambipolaire

La comparaison des mobilités et des coefficients de diffusion libre des électrons et des ions donne :

$$\kappa_i \ll \kappa_e \quad \text{et} \quad D_i \ll D_e$$

Les électrons sont alors plus mobiles et diffusent plus vite que les ions. Cela est dû au fait que l'on a :

$$m_i \ll m_e$$

On peut le vérifier par un calcul d'ordre de grandeur en posant dans les équations 3.3.27 et 3.3.24 :

$$\bar{z} \sim n\sigma \sqrt{\frac{KT}{m}}$$

avec σ une certaine section efficace. Ce qui donne alors :

$$\kappa \sim \frac{q}{n\sqrt{K}} \sigma^{-1} (mT)^{(-1/2)}$$

$$D \sim \frac{\sqrt{K}}{n} \sigma^{-1} m^{(-1/2)} T^{(1/2)}$$

Chapitre 3. Notions générales sur les plasmas et les gaz ionisés

Les rapports des mobilités et des coefficients de diffusion libre des électrons et des ions peuvent être écrits ainsi :

$$\frac{\kappa_e}{\kappa_i} \simeq \frac{\sigma_i}{\sigma_e} \left(\frac{m_i}{m_e} \right)^{1/2} \left(\frac{T_i}{T_e} \right)^{1/2} \frac{q_e}{q_i}$$

$$\frac{D_e}{D_i} \simeq \frac{\sigma_i}{\sigma_e} \left(\frac{m_i}{m_e} \right)^{1/2} \left(\frac{T_i}{T_e} \right)^{-1/2}$$

A priori les sections efficaces apparues dans les équations précédentes sont du même ordre de grandeur [112]. Pour les faibles valeurs de champ électrique réduit, on a d'ailleurs $T_e = T_i = T$; en obtient alors pour un ion monochargé :

$$\frac{\kappa_e}{\kappa_i} \simeq \sqrt{\frac{m_i}{m_e}}$$

$$\frac{D_e}{D_i} \simeq \sqrt{\frac{m_i}{m_e}}$$

Pour les valeurs de l'intensité électrique pas très faibles, si l'on peut négliger les variations des sections efficaces, l'inégalité $D_i \ll D_e$ est renforcée ($T_i < T_e$) tandis que l'inégalité $\kappa_i \ll \kappa_e$ est dans une certaine mesure affaiblie.

Tenant compte des dernières remarques, dans un plasma, lorsque la densité des porteurs de charge varie, les électrons devraient diffuser plus vite que les ions laissant derrière eux un surpeuplement d'ions positifs. Le plasma n'est alors plus neutre localement, ce qui engendre un champ électrique interne qui tend à s'opposer à la diffusion des électrons de sorte que les deux catégories de particules (positive et négative) diffusent à la même vitesse (solidairement) pour maintenir la neutralité électrique locale ; c'est ce qu'on appelle le phénomène de la diffusion ambipolaire. Celui-ci est caractérisé par un facteur appelé : « le coefficient de diffusion ambipolaire parfaite », défini ainsi :

$$D_a = \frac{\kappa_i D_e + \kappa_e D_i}{\kappa_i + \kappa_e}$$

L'ordre de grandeur de D_a peut s'obtenir en portant dans la dernière relation les expressions approchées des mobilités et des coefficients de diffusion établies précédemment ; elle vient :

$$D_a \simeq D_i \left(1 + \frac{T_e}{T_i} \right)$$

Chapitre 4

État de l'art sur l'interaction combustion et plasma froid

Sommaire

4.1	Allumage par décharges électriques	68
4.2	Traitement des émissions par champs électriques	69
4.3	Contrôle de stabilité par champs électriques	71
4.3.1	Mécanismes d'interaction	71
4.3.2	Effets de l'application d'un champ électrique sur les caractéristiques de stabilisation de la combustion	72
4.3.3	Conclusions	82

Les deux chapitres précédents avaient pour objectif de présenter quelques facettes de la combustion et des plasmas jugées utiles à la compréhension de ce travail. Le but de ce quatrième chapitre est de présenter des travaux permettant de mettre en avant et de comprendre certains phénomènes physiques dus à l'interaction entre ces deux domaines.

Les effets de champs et décharges électriques sur les flammes ont été largement étudiés depuis des décennies [4, 8]. La stabilisation des flammes, la réduction de la formation du carbone et d'oxyde d'azote, l'augmentation de la vitesse de flamme, le prolongement des limites d'inflammabilité et de soufflage, l'augmentation de la luminosité de flamme et l'extinction, la diminution du délai et de température d'allumage, sont parmi les effets qui ont été observés. Dans ce chapitre, une revue bibliographique non exhaustive de ces divers effets et des différents mécanismes d'interactions susceptibles d'améliorer la combustion est exposée. L'accent est mis sur la stabilisation des flammes soumises aux champs électriques de faible intensité. Une synthèse, permettant de situer notre travail dans la littérature et de mettre en place les enjeux recherchés, est établie à la fin de ce chapitre.

Les plasmas froids peuvent aider le déclenchement de la combustion, jouer un rôle sur la stabilisation de la flamme ou encore influencer sur les polluants. Dans le cas d'allumage on parle plutôt de décharge que de champ électrique. Toutefois, les travaux dans la littérature s'accordent sur l'efficacité de champs électriques relativement faibles, comme sur celle des décharges de fortes intensités, à améliorer les caractéristiques de stabilisation des flammes et diminuer leurs émissions polluantes. Comme dit dans le chapitre de l'introduction, la différence sur la combustion entre un faible et un fort champ électrique est assez simple. En faibles champs, il n'y a pas de création d'espèces chargées et le potentiel appliqué agit sur les espèces déjà présentes. Cependant, à forts champs, on crée de nouvelles espèces chargées en plus de celles déjà présentes.

Dans ce qui suit, le principe et quelques études d'allumage et de traitement d'émissions polluantes par plasmas sont présentés. La stabilisation des flammes par champ électrique relativement faible étant le thème de cette thèse, ce sujet est abordé plus en détail.

4.1 Allumage par décharges électriques

Les techniques classiques mises en œuvre dans les procédures d'allumage utilisent une étincelle qui induit de forts courants d'une dizaine d'Ampères et conduit à un plasma thermique très chaud. Malgré que cette technique permette de créer suffisamment de radicaux excités pour le déclenchement de la combustion, la décharge produite reste très locale, ce qui pose des problèmes de non-uniformité et des ratés d'allumage, notamment en combustion pauvre (voir, par exemple, [131]). C'est dans ce contexte que l'intérêt de l'initiation de la combustion par les décharges non-thermiques apparaît. Ce nouveau type d'allumage peut produire des zones d'allumage plus étendues, uniformes et stables ; le tout avec une très faible consommation électrique. À cet égard, des exemples, montrant un allumage efficace permettant la diminution des délais et des températures d'inflammation à des pressions modérées dans de larges intervalles de richesses et de vitesses d'écoulement, y compris les mélanges pauvres et les écoulements supersoniques, sont analysés dans les revues [2, 132, 133].

Le mécanisme thermique d'allumage est basé principalement sur l'augmentation de la température dégagée par le plasma et ne requiert aucune contribution spéciale des espèces actives produites dans le plasma. Il concerne généralement les décharges électriques thermiques, comme l'arc thermique, conduisant à un allumage thermique qu'on peut qualifier de classique. Les décharges électriques non-thermiques de forte intensité, comme la décharge à barrière diélectrique, la décharge couronne ou encore l'arc non thermique, sont aussi capables d'augmenter la température du gaz et de stimuler, dans certaines conditions, un mécanisme thermique d'allumage.

4.2 Traitement des émissions par champs électriques

Cependant, ces décharges hors d'équilibre peuvent déclencher un mécanisme non-thermique d'allumage beaucoup plus efficace. Ce mécanisme implique une stimulation des chaînes de réaction d'oxydation du carburant, menant à l'inflammation du mélange, non pas seulement avec l'augmentation de la température, mais également par la contribution de certaines espèces actives spécifiques générées par le plasma : des atomes et des molécules excités, des radicaux et des particules chargées.

Ce dernier mécanisme a des avantages significatifs par rapport au mécanisme thermique, car il nécessite beaucoup moins d'énergie et peut fournir un allumage plus uniforme et bien contrôlé pour la stabilisation des flammes. En d'autres mots, le mécanisme non-thermique est capable d'utiliser l'énergie du plasma de façon sélective, en donnant de l'énergie uniquement aux espèces actives contribuant à l'allumage, alors que le mécanisme thermique d'allumage distribue de l'énergie sur tous les degrés de liberté dont la plupart sont sans rapport avec l'allumage de la flamme, et peuvent favoriser des pertes thermiques et des instabilités importantes.

Les plasmas non-thermiques ont confirmé leur efficacité pour assister l'allumage de la combustion, en particulier en régime pauvre. Toutefois, leur utilisation à haute-pression, à cause des instabilités et la transition vraisemblable à l'arc thermique, est encore problématique, ce qui pourrait limiter les applications possibles, notamment pour l'automobile et l'aéronautique.

4.2 Traitement des émissions par champs électriques

Depuis quelques années, la dépollution des effluents gazeux par l'utilisation des plasmas froids reçoit l'attention des milieux scientifiques et industriels. Le concept de base est d'exploiter la réactivité chimique des radicaux et espèces créés au sein du plasma pour transformer les molécules polluantes en molécules inoffensives. Cette procédure bénéficie d'une grande flexibilité d'utilisation et peut s'adapter à des débits de gaz très variables. Ces avantages ont même rendu envisageable son utilisation sur des cheminées de centrales et sur des pots d'échappement automobiles [134]. Parallèlement à cette procédure de dépollution, la diminution des concentrations des émissions polluantes et des suies de combustion peut être obtenue par l'application de champs électriques. À ce titre, un résumé montrant le potentiel du champ électrique à contrôler les effluents de combustion est donné ci-dessous.

La réduction des émissions polluantes et de concentrations des suies est l'un parmi les principaux effets qui peuvent être observés lorsqu'un champ électrique est appliqué à une flamme. Saito et al. [135, 136], par exemple, ont constaté expérimentalement une forte modification de la forme et de la température des flammes de diffusion d'acétylène accompagnée par une dimi-

nution, indépendante de la polarité du brûleur, de l'émission des suies avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique. Cette étude a conclu que la réduction des suies par application du champ électrique était la conséquence de l'oxydation de ces particules due à l'augmentation de la température. Les auteurs attribuent cette hausse de température à l'entraînement d'air favorisé par le vent ionique (le phénomène de vent ionique sera décrit dans la section suivante).

Dans les expériences de Vatashin et al. [137] et Sepp et al. [138], les auteurs ont étudié la possibilité de diminuer l'index d'émission des (NO_x), provenant des flammes de diffusion laminaires, par un potentiel électrique longitudinal appliqué directement au brûleur. Dans la première expérience, seule une polarité continue négative du brûleur a été testée, tandis que dans la deuxième, les deux polarités (positive et négative) sont appliquées. Pour une polarité négative, les deux études ont démontré que l'index d'émission des (NO_x) peut être réduit significativement (20 jusqu'à 30%). Dans la deuxième expérience, cette diminution a été accompagnée par une augmentation de l'index d'émission de (CO) ; par ailleurs, l'effet opposé a été observé pour une polarité positive indiquant la dépendance de ces effets à la polarité du champ appliqué. Les auteurs de la première étude ont expliqué les effets observés par un abaissement de la température locale en zone proche de la zone de combustion en conséquence de l'accroissement des pertes de chaleur, dû à l'augmentation du rayonnement dans cette zone. Ce dernier effet est supposé le résultat de l'augmentation de la concentration locale des particules de suie et de leur temps de résidence proche de la zone de combustion, à cause de la diminution de leur vitesse sous l'effet de la polarité négative du brûleur. En revanche, les variations des émissions de (NO_x) et de (CO) dans la deuxième expérience ont été attribuées au changement de la dynamique de la flamme, c'est-à-dire la géométrie de la flamme.

Afin de trancher sur le mécanisme à l'origine de cette diminution d'oxyde d'azote obtenue dans les expériences précédentes [137, 138], un modèle mathématique simplifié a été proposé dans la simulation numérique d'Ulybyshv [75]. Ce modèle a inclus : les équations hydrodynamiques pour décrire un écoulement en présence de forces électriques écrites en utilisant la formulation fonction de courant-vorticité, les équations du transport des composants du mélange, une équation pour la concentration des ions positifs et une équation de Poisson pour le potentiel électrique. Le calcul surestime la déformation de la flamme et la diminution de la production de (NO), mais les résultats sont qualitativement corrects. Les imprécisions du calcul sont attribuables à la connaissance inexacte de la mobilité des ions et à la formation possible d'ions négatifs, exclus du modèle, notamment dans les zones du jet relativement froides. L'auteur a conclu que les variations de (NO_x) résultent de la modification de la dynamique de la flamme sous l'effet du vent ionique.

Toujours, dans le but de contrôler les émissions des (NO_x), des expériences [139, 140] sur des

4.3 Contrôle de stabilité par champs électriques

flammes de propane, se propageant dans des canaux sous l'action d'un faible champ électrique, sont réalisées. Les résultats montrent que l'interaction entre le champ électrique radial appliqué et la flamme initialise un mouvement des ions positifs dans la direction du champ. L'échange d'énergie entre ces ions et les particules du gaz produit un transfert interdépendant de chaleur et de masse vers les parois du canal. En conséquence, une réduction de la température de la flamme est obtenue, abaissant ainsi significativement la formation thermique de (NO_x) et influençant directement la formation des suies.

Dans l'ordre de savoir si les effets observés persistent à de hautes pressions, Sakhrieh et al. [141] ont étudié l'influence du champ électrique sur des flammes Bunsen de prémélange turbulentes pour des pressions variant de 1 à 10 bars. Les expériences ont montré que les émissions de (CO) pourraient être réduites, indépendamment de la pression, d'environ 95 %. Cependant, cette diminution a été accompagnée par une augmentation des émissions de (NO_x) d'environ 25%, ce qui contredit les résultats des expériences citées précédemment [137, 138]. Cette contradiction peut s'expliquer par la différence géométrique entre les deux configurations électriques, puisque dans le dernier cas, le champ électrique est appliqué à une électrode placée dans la flamme et non à l'injecteur comme les cas précédents [137, 138]. Les résultats obtenus montrent donc que l'influence du champ électrique est clairement visible pour les grandes pressions ; c'est ainsi que les auteurs ont conclu que la haute pression devrait favoriser plutôt qu'entraver les effets du champ électrique sur les flammes. Les effets observés sont, encore ici, expliqués par l'influence unique du vent ionique.

À la vue de ce qui précède, le champ électrique se montre très efficace pour contrôler les suies et la concentration en composés polluants. Ainsi, sa bonne efficacité énergétique peut justifier son utilisation pour le traitement des polluants de la combustion.

4.3 Contrôle de stabilité par champs électriques

Avant d'examiner les différents effets des champs électriques sur les caractéristiques de stabilisation des flammes, essayons d'abord de comprendre les mécanismes possibles de l'interaction : flamme et champ électrique et comment ce dernier peut être utilisé pour le contrôle de la combustion.

4.3.1 Mécanismes d'interaction

Dans la littérature, on voit ressortir essentiellement deux mécanismes différents susceptibles d'améliorer la combustion par application de champs électriques relativement faibles :

Déplacement des espèces chargées sous l'action de la force électrique induite par l'application du champ électrique : « Vent ionique »

Du fait de la présence naturelle des espèces chargées, le comportement aérodynamique de la flamme peut être modifié à l'aide du champ électrique. En effet, lorsqu'un champ électrique extérieur est appliqué à une flamme, les particules chargées positives et négatives se séparent ; l'électroneutralité n'est alors plus respectée localement et une force électrique est créée. Cette force, qui augmente avec l'intensité du champ électrique et la densité des espèces chargées comme le montre l'équation de transport de quantité de mouvement (éq. 3.2.13), produit un déplacement d'ions. Ces ions, via des collisions, transfèrent leur quantité de mouvement aux espèces neutres, et cela peut donc modifier le comportement dynamique de la flamme. Ce phénomène de collision ion-molécule, nommé le vent ionique, est majoritairement considéré dans la littérature comme le principal responsable des effets observés.

Modification de la chimie

En plus de l'effet direct du vent ionique sur la dynamique de l'écoulement du mélange des gaz, l'application du champ électrique peut aussi provoquer un changement dans la distribution de la température. Également, les ions, sous l'effet de champ électrique, se déplacent vers les gaz frais et peuvent causer une activation des réactions de collisions combinant espèces chargées et molécules neutres. Plus la tension appliquée est grande, plus ces ions sont capables de réagir avec les molécules neutres. En conséquence de ces effets de modification de température et d'intensification du transfert des espèces chargées, la vitesse de combustion peut être augmentée et peut alors contribuer aux modifications observées des caractéristiques de stabilisation.

Plusieurs études ont essayé d'identifier lequel de ces deux derniers mécanismes contribuait le plus dans la modification du comportement de la flamme en présence du champ électrique. Néanmoins, aucune solution n'a pu être écartée. L'identification formelle du ou des mécanismes d'interaction reste donc une question ouverte.

4.3.2 Effets de l'application d'un champ électrique sur les caractéristiques de stabilisation de la combustion

La stabilisation des flammes est l'un des points clés pour la conception d'un brûleur. Par conséquent, l'amélioration des caractéristiques de décrochage, de soufflage et de raccrochage des flammes par application de champ électrique a été étudiée intensivement lors de ce dernier

siècle [4, 8, 142]. D'une manière schématique, les études sur cette thématique peuvent être classées selon deux époques :

4.3.2.1 Études anciennes

Dès 1814, Brande [1] rapporta que le champ électrique influence le transfert de chaleur et de masse entre une flamme de bougie et les électrodes, de telle sorte que la flamme et les suies sont attirées vers l'électrode chargée négativement. Au début du siècle précédent, plusieurs auteurs constatèrent qu'il est possible d'influencer la vitesse de propagation ainsi que d'autres caractéristiques de la flamme en utilisant un champ électrique [4].

Dans ces premiers travaux, l'influence des champs électriques relativement faibles sur la propagation des flammes a été l'un des principaux sujets. La majorité des auteurs [4] ont reporté que la vitesse de propagation des flammes d'hydrocarbures dans un canal diminue avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique. L'enrichissement du mélange avec du carburant ou le relèvement de pression avait pour effet une plus forte influence du champ électrique sur les caractéristiques de propagation. D'autres auteurs se sont intéressés à l'amélioration des limites de décrochage et de rattachage des flammes par application de champs électriques. Larnov et Malinovsky (1933) [143], par exemple, ont constaté qu'un champ électrique longitudinal de courant continu, appliqué entre une grille métallique placée à l'intérieur du tube de brûleur et une sphère métallique d'une tension positive placée au-dessus du brûleur, a favorisé le décrochage de la flamme et a empêché son rattachage au brûleur, ce qui présentait des effets négatifs sur la stabilisation des flammes. Toutefois, une augmentation de la limite du décrochage a été observée par Calcote [144, 145] en appliquant une tension continue, et par Polanyi et Markstein [146] en appliquant une tension alternative. Ces effets observés dépendent de la polarité du champ électrique utilisé ; selon Calcote [145], par exemple, la limite du débit d'écoulement, menant au décrochage d'une flamme d'un brûleur Bunsen, a été augmentée (jusqu'à 100%) lorsque le brûleur est à la cathode, mais elle a diminué lorsque le brûleur est à l'anode.

Bien que la plupart des phénomènes observés aient été jugés comme négatifs à l'époque, ils sont considérés par la suite comme très prometteurs pour l'amélioration des caractéristiques de stabilisation des flammes. En effet, au cours de la deuxième moitié du dernier siècle, de nombreuses investigations ont été consacrées à l'influence des champs électriques sur les caractéristiques de stabilisation des flammes. Un examen exhaustif de ces travaux se trouve dans les revues : Stepanov and Dyachkov (1968) [147], Lawton and Weinberg (1969) [8], Weinberg (1986) [142] et plus récemment Fialkov (1997) [4]. Souvent, une configuration à deux électrodes, appelée aussi configuration en circuit fermé, dans laquelle une des électrodes est placée verti-

calement près ou dans la flamme à une certaine distance du brûleur métallique qui joue le rôle d'une deuxième électrode, est adoptée. Dans ces travaux, il a été montré que l'ampleur de la modification des caractéristiques dynamiques des flammes est définie essentiellement par la valeur du courant électrique polarisant la flamme [148–151]. Également le plus grand effet est observé lorsque le champ électrique est configuré de telle sorte que la chute principale de potentiel soit localisée dans l'espace situé entre la base de la flamme décrochée et le brûleur [4, 152]. Selon ces expériences, l'intensité des effets observés est donc indépendante de l'espace inter-électrodes, et les caractéristiques de stabilisation ne dépendent alors que de la valeur de la chute du potentiel électrique dans la zone entre l'injecteur et la flamme liftée. En général, deux mécanismes sont suggérés pour expliquer les effets observés : l'augmentation de la vitesse de combustion et/ou la diminution de la valeur locale de la vitesse de l'écoulement sous l'effet du vent ionique.

Bien que dans la plupart des cas, les résultats expérimentaux ont pu être expliqués (au moins qualitativement) par l'action du vent ionique sur la vitesse de l'écoulement, la question de l'effet du champ électrique sur la vitesse de combustion n'est pas encore réglée. Des discussions critiques sur les mécanismes possibles de stabilisation de la flamme dans un champ électrique, impliquant notamment le vent ionique, peuvent être trouvées dans la littérature [151, 153].

4.3.2.2 Études récentes et actuelles

Depuis une vingtaine d'années, l'interaction entre champ électrique et combustion connaît un véritable essor ; les études, en particulier des expériences, ne cessent de se multiplier et plusieurs chercheurs se sont penchés sur les aspects électriques de la combustion.

Études expérimentales

Ces études sont variées : flammes laminaires ou turbulentes, de prémélange ou de diffusion, en interaction avec une tension continue (positive ou négative) ou alternative. Les conditions expérimentales sont très différentes d'une étude à une autre, notamment en ce qui concerne la nature du carburant, le positionnement des électrodes, l'intensité et la polarité électriques. Il est donc difficile, voire impossible de les comparer entre elles. Nous nous contenterons donc ici de présenter les principaux résultats obtenus ainsi que les interprétations proposées.

Tout d'abord, deux types de configurations d'électrodes ont été fréquemment adoptés : circuit fermé et circuit ouvert. Dans le cas de la première configuration, comme le montre la figure 4.1, deux électrodes sont utilisées : l'une est placée horizontalement près ou dans la flamme et l'autre est positionnée au niveau de l'injecteur. Ce positionnement induit des courants

4.3 Contrôle de stabilité par champs électriques

plus importants, cependant il pourrait poser des problèmes tels que la limitation géométrique et la contamination de l'électrode placée dans la flamme, à cause de son exposition aux gaz brûlés chauds. À cet égard, une configuration à une seule électrode (c'est-à-dire sans électrode de masse), dans laquelle l'injecteur métallique sert d'électrode haute-tension, a été proposée (voir figure 4.2) [10, 154]. Cette configuration ressemble à la situation de la configuration à deux électrodes avec une des électrodes placée à l'infini.

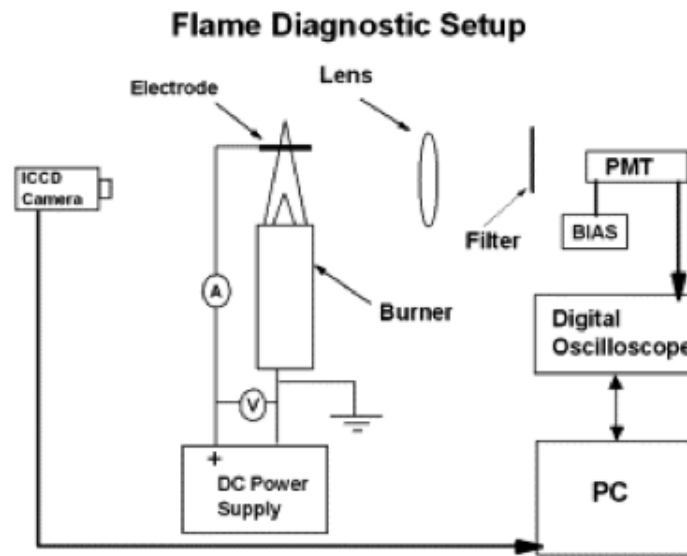


Figure 4.1 – Schéma du montage expérimental d'une configuration double-électrode (circuit fermé) [155].

La configuration mono-électrode a été appliquée pour étudier l'effet des champs électriques sur la stabilisation des flammes liftées de propane turbulentes par Lee et al. [10] et laminaires par Won et al. [156]. Dans la première étude, les auteurs ont observé une diminution de la hauteur de stabilisation avec l'augmentation de la tension en polarité alternative, impliquant un prolongement de la plage des vitesses pour lesquelles la flamme est stable. Néanmoins, l'effet a été minime lors de l'application de la tension continue. Dans le deuxième article, l'effet du champ électrique alternatif sur les caractéristiques (hauteurs et vitesses) de raccrochage a été démontré. On a constaté que le champ électrique a permis le raccrochage de la flamme liftée même à des vitesses très élevées. Par ailleurs, les résultats présentés sur les deux articles, concernant la dépendance des effets de la fréquence, semblent contradictoires. En effet, dans le premier article [10], les auteurs observent une plus forte modification des caractéristiques de stabilisation quand ils augmentent la fréquence du générateur, alors que dans le second article [156], la modification est d'autant plus notable que la fréquence est faible. Won et al. [156] n'ont pas proposé d'interprétation physique pour expliquer cette différence ; cependant,

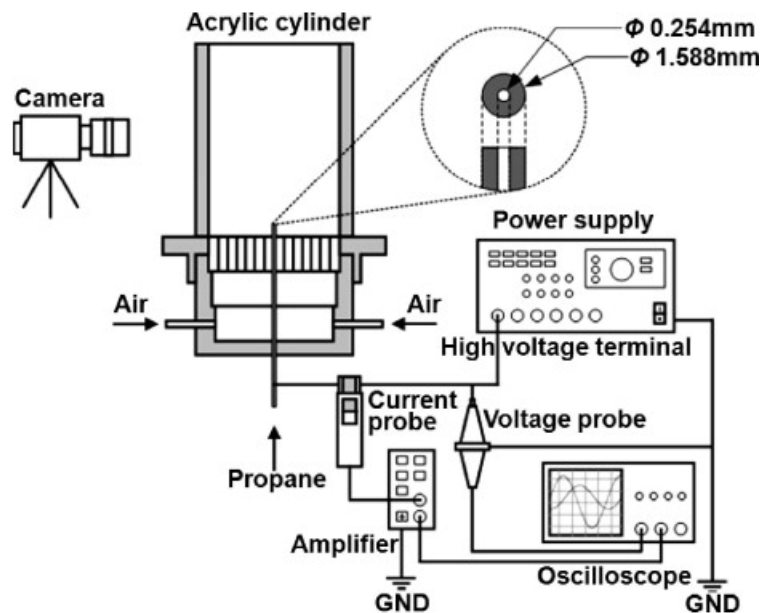


Figure 4.2 – Schéma du montage expérimental d'une configuration mono-électrode (circuit ouvert) [154].

ils ont analysé l'effet du champ électrique alternatif sur la vitesse de propagation de la base de flamme en observant son comportement transitoire pendant le processus de raccrochage. Cette caractéristique a été définie comme la somme vectorielle de la vitesse de déplacement du front de flamme dans le repère de laboratoire et la vitesse axiale locale de l'écoulement. Cette dernière est calculée à partir des solutions de similitude des jets à COFLOW adoptées dans des travaux antérieurs des mêmes auteurs [157, 158], tandis que la vitesse de déplacement de la base de flamme est définie comme la vitesse avec laquelle la hauteur de suspension varie au cours du temps. L'amélioration des limites de raccrochage a été attribuée à l'augmentation de la vitesse de propagation sous l'effet du champ électrique.

Dans une configuration similaire du même groupe de recherche, en appliquant des tensions continues positives et négatives, Won et al. [159] ont ainsi observé des améliorations de la vitesse de propagation similaires à celles observées en polarité alternative. Ces variations sont supposées être la cause de l'amélioration des caractéristiques de stabilisation en polarité alternative dans leur étude précédente [156]. Néanmoins, malgré les changements de la vitesse de propagation en polarité continue dans la nouvelle étude [159], les champs électriques continus avaient un effet minime sur le comportement des flammes dans le premier travail [156]. Aucune analyse claire n'a été réalisée pour expliquer cette contradiction.

Dans une étude plus récente [154], ces mêmes auteurs ont étudié la réponse des vitesses de décrochage et de soufflage au champ électrique dans la même configuration [159]. Leurs résultats

4.3 Contrôle de stabilité par champs électriques

ont montré un prolongement de la plage des vitesses de carburant, pour lesquelles la flamme est stable, par application du champ électrique alternatif. En augmentant l'intensité du champ électrique alternatif, la flamme a été donc maintenue accrochée à l'injecteur même dans le cas où la vitesse de carburant, dans l'absence du champ électrique, cause le soufflage de la flamme. Pour le cas du champ électrique continu, l'effet a été toujours minime. Trois différents régimes dépendant de la tension alternative appliquée ont été déterminés. Un régime de basse tension où la vitesse de détachement augmente avec la tension et la fréquence appliquées. Dans le régime de tension intermédiaire, la vitesse pour laquelle la flamme décolle du brûleur reste supérieure à la vitesse de décrochage sans champ électrique appliqué, mais elle diminue avec l'augmentation de la tension et elle est quasiment indépendante de la fréquence. Cette diminution a été partiellement attribuée aux perturbations de l'écoulement associées au développement d'une décharge couronne. Au régime des hautes tensions, le décrochage a été fortement influencé par la génération des décharges ; la vitesse de décrochage a continué de diminuer avec l'augmentation de la tension appliquée et elle devient plus petite qu'elle ne l'était sans champ électrique. Les hautes tensions ont donc pour effet de détériorer plutôt que d'améliorer la stabilité de la flamme. Ces ambiguïtés au niveau des résultats sont restées sans interprétation physique de la part des auteurs.

Les flammes prémélangées ont également eu leur part dans les études utilisant une configuration électrique en circuit ouvert. La réponse des caractéristiques de stabilisation, notamment la vitesse de détachement, à la tension alternative est étudiée expérimentalement pour des flammes de méthane laminaires brûlant sur un bec Bunsen [160, 161]. Les résultats ont montré que la flamme pourrait rester accrochée au brûleur même à des vitesses cinq fois plus grandes que la vitesse de décrochage sans champ électrique appliqué. Une fréquence de transition (40 à 50 Hz) entre les régimes basse et haute fréquence, en-dessous de laquelle le champ électrique a un effet minime sur stabilisation de la flamme, a été identifiée. Pour les régimes de tensions électriques modérées de hautes fréquences, des oscillations de la base de la flamme avec une fréquence synchronisée avec la fréquence du champ électrique ont été observées. Les effets trouvés sont expliqués par l'effet du vent ionique.

Les flammes laminaires prémélangées de type bec-Bunsen sont également investiguées dans les travaux récents de Marcum [162] et Wisman [155], mais cette fois dans une configuration en circuit fermé. Le système d'injection est utilisé comme électrode de masse, et l'électrode de haute-tension est placée dans la flamme. Ils ont testé des tensions continues positives et négatives, mais n'ont observé de modifications du comportement de la flamme qu'avec la tension positive, indiquant que les espèces chargées négatives ne jouent pas de rôle dans les perturbations observées. Ils ont noté une augmentation de la vitesse de propagation et une tendance du

front de flamme vers la turbulence (production des instabilités). Ils concluent de ces résultats que le vent ionique ne peut pas seul expliquer ces phénomènes, et attribuent une partie des effets observés à la création d'instabilités thermo-diffusives qui modifient la vitesse de propagation de la flamme. Ils considèrent que la présence du champ électrique, à travers les recombinaisons dissociatives des ions, induit une production des radicaux légers essentiellement dans la zone de préchauffage. Cela, d'après les auteurs, cause la réduction du nombre de Lewis ; et effectivement les résultats observés, qui dominent la structure de la flamme, sont typiques à des flammes avec des nombres de Lewis globaux inférieurs à l'unité.

Dans une étude antérieure, Vinogradov [163] a également étudié l'effet des tensions continues positives et négatives, appliquées en circuit fermé, sur une flamme prémélangée de bec Bunsen méthane/air laminaire. En revanche, leur disposition d'électrodes est différente de celle de Marcum et Wisman [155, 162]. Le brûleur est mis à la haute-tension et un maillage mis à la masse est placé au dessus de la flamme à une hauteur variable. En polarité positive, qui correspond à une polarité négative dans la configuration de [155, 162] (Dans ce cas, ce sont les anions qui contrôlent la direction du vent ionique), lorsque l'on augmente le potentiel, on observe une diminution de la hauteur de la flamme et le développement d'instabilités menant à l'extinction de la flamme. Ce résultat contredit la conclusion, éliminant le rôle des anions, faite par les auteurs des travaux postérieurs [155, 162]. En polarité négative, une diminution identique de la hauteur de flamme est obtenue pour une polarisation plus élevée. Une partie de la différence du comportement entre les deux polarités peut être expliquée par le fait que ce ne sont pas les mêmes ions qui pilotent la direction du vent ionique. La différence de mobilité des ions majoritaires concernés (notamment H_3O^+ en polarité négative et O_2^- en polarité positive de cette configuration) permettrait d'expliquer les différences observées entre les deux polarités. D'autre part, en augmentant la distance inter-électrodes, l'extinction de la flamme s'achève pour une valeur de tension minimale plus élevée.

Sur le dispositif expérimental du Coria concernant une configuration électrique en circuit ouvert avec un brûleur en céramique isolé électriquement et une électrode positionnée horizontalement dans la flamme, Criner [115] a noté des tendances communes mais aussi des contradictions importantes avec les travaux cités précédemment. Comme dans les articles [10, 154, 159], elle a noté une amélioration de la stabilité lorsqu'elle augmente la fréquence de répétition du générateur de tension alternative. En revanche, elle a obtenu la meilleure amélioration de stabilité en tension continue et non en alternatif contrairement aux auteurs [10, 154, 156, 159], qui n'ont jamais observé d'amélioration notable de la stabilité avec la tension continue. Ainsi, elle a observé un comportement différent que dans l'étude [163] sur des flammes de méthane avec une meilleure stabilisation dans le cas positif (correspondant au cas négatif dans [163])

4.3 Contrôle de stabilité par champs électriques

que dans le cas négatif (correspondant au cas positif dans [163]). Ceci peut être expliqué par la différence entre les dispositions des électrodes dans les deux études. Pour des flammes de propane, la stabilisation est légèrement meilleure en polarité négative. La différence de résultats pour les deux polarités et les deux combustibles peut être expliquée par les différences entre les mobilités des ions majoritaires dans les flammes de propane et celles des ions majoritaires dans le cas des flammes de méthane. Etant en régime turbulent, il n'a pas été possible d'observer une différence au niveau d'un développement d'instabilités.

Ainsi, Criner s'est demandée comment se comporterait la flamme dans le cas d'un circuit fermé. Elle a donc changé l'injecteur de céramique pour un injecteur métallique, relié à la masse, servant ainsi de seconde électrode. Avec ce dispositif, elle a observé des diminutions de la hauteur de suspension du même ordre de grandeur que dans le cas du circuit ouvert. Néanmoins, l'amélioration de la stabilisation est un peu moins bonne car la limitation du courant par l'électrode de masse a tendance à faire chuter la tension de la flamme. La configuration en circuit ouvert s'est montrée donc plus avantageuse.

Études numériques

Concernant les études numériques relatives à l'interaction champ électrique et combustion, les travaux sont rares et les informations dans la littérature sont limitées. Cela est, peut être, dû à la nature multidimensionnelle du problème qui couple les effets de transport, de processus chimique et de forces électriques induites.

À notre connaissance, la première tentative solide pour simuler numériquement des flammes multidimensionnelles soumises à des champs électriques est celle de Hu et Rivin en 2000 [74]. Ils ont étudié les effets d'un champ électrique uniforme et axial sur des flammes laminaires de diffusion méthane/air. Le modèle emploie un système bidimensionnel de coordonnées cylindriques avec une symétrie axiale. La cinétique chimique utilisée contient 19 espèces chimiques et 31 réactions ; elle combine un mécanisme approprié à l'oxydation du méthane avec une série de réactions ioniques. Leurs résultats expérimentaux montrent que les flammes étudiées sont significativement influencées par le champ électrique, notamment ce qui concerne la longueur et la largeur de la flamme. Lorsque l'intensité électrique imposée est négative, la diminution de la longueur de la flamme et de sa largeur est l'effet observé, tandis qu'avec les valeurs d'intensité positives, ils ont noté les effets inverses. Il a été conclu que ces effets sont dus essentiellement à l'action du vent ionique. Des effets mineurs dus à la redistribution des espèces ioniques sont également possibles ; cela, cependant, ne peut pas influencer sur les taux des réactions chimiques majeures. La critique qui peut être adressée à ce modèle est que l'intensité du champ électrique

n'est pas résolue, mais est imposée constante et non nulle dans tout le domaine du calcul même dans la flamme. Ceci présente une forte hypothèse du fait que, premièrement, la flamme est un milieu quasi-neutre électriquement (intensité quasi-nulle), à cause de sa diffusion ambipolaire et, deuxièmement, l'application d'un champ électrique externe induit une séparation des charges positives et négatives, notamment au front de la flamme, ce qui produit des gradients d'intensité électrique et par conséquent cette dernière ne peut être constante.

Plus récemment, d'autres modèles plus consistants ont été proposés pour modéliser les écoulements réactifs en présence de champ électrique [77, 93]. Dans ces études, les modèles électro-hydrodynamiques utilisés incluent les équations de conservation de masse, de quantité de mouvement, d'énergie et des espèces neutres et chargées. La détermination de la force électrique est basée sur la loi de Coulomb et l'intensité de champ électrique est définie comme le gradient du potentiel électrique, qui est calculé à partir de la loi de Gauss comprenant la distribution de la charge électrique spatiale. Alors que la cinétique chimique des ions est décrite par 11 réactions ioniques et 9 espèces chargées dans la première étude, elle utilise que 2 réactions ioniques (une réaction de chimi-ionsation et une autre de recombinaison) et 2 espèces chargées dans la deuxième étude. Ainsi, comme dans toutes les autres quelques études numériques présentes dans la littérature, les anions sont négligés et seulement les électrons sont considérés pour représenter la charge électrique négative. Les auteurs des deux articles comparent la simulation numérique avec l'expérience afin de décrire les mécanismes sous-jacents responsables de la réponse de flamme sous l'effet du champ électrique. Un accord quantitatif avec l'expérience n'a pas pu être obtenu, ceci est justifié par les nombreuses hypothèses faites dans la formulation du modèle physique, ainsi que par les simplifications de la géométrie et des conditions réelles de l'écoulement dans la construction du modèle numérique. Néanmoins, les modèles affichent une sensibilité de la dynamique de l'écoulement au champ électrique similaire à celle observée expérimentalement. Une fois de plus, les effets observés sont attribués en grande partie au vent ionique.

4.3 Contrôle de stabilité par champs électriques

Étude	Circuit	Électrodes		Flamme étudiée	Principaux effets observés	
		Haute tension	Masse		Polarité alternative	Polarité Continue
Lee et al. (2005) [10].	Ouvert.	Injecteur métallique.		Turbulente liftée de propane.	Meilleure amélioration de stabilisation avec l'augmentation de la fréquence.	Effets minimes.
Won et al. (2007 et 2008) [156, 159].	Ouvert.	Injecteur métallique.		Laminaire liftée de propane.	Meilleure amélioration de stabilisation avec la diminution de la fréquence.	Effets minimes.
Kim et al. (2010) [154].	Ouvert.	Injecteur métallique.		Laminaire liftée de propane.	Modification de la vitesse de propagation.	Effets minimes.
Kim et al. (2011) [160, 161].	Ouvert.	Injecteur métallique.		Laminaire prémélangée de méthane.	Limites de décrochage améliorées aux tensions faibles et modérées, Et, dégradées aux tensions plus élevées.	Effets minimes.
Marcum et Wisman (2005 et 2007) [155, 162].	Fermé.	Placée dans la flamme.	Injecteur métallique.	Laminaire prémélangée de propane.	Amélioration des limites de décrochage pour les fréquences supérieures à 40-50 (Hz).	Modification du comportement de la flamme en polarité positive seulement.
Vinogradov et al (2001) [163].	Fermé.	Injecteur métallique.	Placée dans la flamme.	Laminaire prémélangée de méthane.		Meilleure amélioration de la stabilité en polarité positive qu'en polarité négative; Extinction de flamme aux fortes tensions.
Criner (2008) [115].	Ouvert ou fermé.	Placée dans la flamme.	Injecteur céramique ou métallique.	Turbulente liftée de méthane ou de propane.	Meilleure amélioration quand la fréquence est augmentée.	Meilleure stabilité que le cas alternatif; Meilleure stabilité en polarité positive pour le méthane et en polarité négative pour le propane.

Tableau 4.1 – Tableau synthétisant quelques études expérimentales.

4.3.3 Conclusions

La plupart des études, présentées ci-dessus, se caractérisent par l'observation des améliorations de la combustion sous l'effet du champ électrique dans des configurations où la consommation énergétique reste négligeable (quelques Watt/h) devant la puissance thermique des flammes (des dizaines de kWatt/h). Cependant, il reste difficile de conclure sur les propriétés des champs électriques utiles à l'amélioration de la combustion, du fait de la disparité des résultats, en particulier concernant le type et la polarité du champ appliqué. Cette disparité peut venir de différences de configurations électriques, qui peuvent avoir des effets importants sur la forme du champ électrique généré, et des différences de nature des combustibles utilisés.

Il est donc difficile de tirer des conclusions sur quel est le phénomène physique clé responsable de l'amélioration de la stabilisation. C'est vrai que le vent ionique est souvent considéré comme seul responsable des modifications observées, néanmoins, en raison des disparités entre les résultats et les interprétations proposées, l'identification absolue du ou des mécanismes d'interaction reste une question ouverte.

La simulation numérique peut être une approche utile pour répondre à ces diverses dernières questions. Toutefois, jusqu'à présent, seules quelques études ont proposé des approches de modélisation pour la combustion en présence d'un champ électrique [74, 75, 77, 93]. Dans ces études numériques, les ions négatifs sont négligés et seul le mouvement des ions positifs sous l'effet du champ électrique continu a été examiné. Également, aucune tentative n'a été trouvée dans la littérature simulant la réponse de la combustion à la polarité alternative du champ électrique.

Dans le présent travail de thèse, un modèle mathématique simplifié, qui sera présenté dans le chapitre suivant, incluant les cations, les anions et les électrons a été développé ; et plusieurs simulations numériques avec les deux types de polarités : continue (positive et négative) et alternative sont réalisées. Les principaux objectifs de cette étude sont : (1) de qualifier la capacité du phénomène du vent ionique à influencer la stabilisation de la flamme, et (2) de fournir un outil numérique permettant de prédire le comportement de la flamme sous l'effet d'un champ électrique externe.

Chapitre 5

Description du modèle mathématique

Sommaire

5.1	Équations modèles	84
5.2	Propriétés de transport des espèces chargées	87
5.3	Mécanisme de la cinétique chimique	89
5.3.1	Revue des cinétiques	89
5.3.2	Cinétique des espèces neutres	91
5.3.3	Cinétique des espèces chargées	92
5.4	Procédure numérique	103
5.4.1	Détails sur le code de calcul SiTCom	103
5.4.2	Contributions apportées	104

La modélisation numérique de l'interaction entre champ électrique et flamme conduit à la résolution d'un modèle constitué de deux volets :

- (1) un modèle électro-hydrodynamique dans lequel le mouvement de fluide et le champ thermique sont déterminés. Ce volet combine les aspects de la combustion (transport, processus chimique, ...etc.) et les forces électriques induites par l'application de champ électrique.*
- (2) un modèle ionique dans lequel la distribution de la charge spatiale et de l'intensité électriques sont calculées.*

Dans le présent travail, un modèle mathématique simplifié permettant de modéliser la combustion en présence d'un champ électrique a été développé. Les équations de l'aérothermochimie sont couplées à des équations de bilan pour les densités des ions (positifs et négatifs) et des électrons, et une équation de Poisson pour le potentiel électrique est résolue. Ce modèle n'incorpore pas les effets possibles du champ électrique sur la chimie de la combustion et contient seulement les effets du vent ionique; l'objectif est de vérifier l'aptitude du vent ionique à influencer la stabilisation des flammes.

Ce chapitre est consacré à la description de la méthodologie utilisée pour étudier le phénomène. Il fournit les équations régissant le modèle et toutes les propriétés nécessaires. Ainsi, il présente les mécanismes de la cinétique chimique employés et la manière dont les taux des réactions sont obtenus. La procédure numérique utilisée dans le code de calcul est également décrite dans ce même chapitre.

5.1 Équations modèles

Le problème considéré est gouverné par les équations classiques d'un écoulement gazeux, compressible et réactif (cf. section 2.3.1.2), avec présence des forces électriques (cf. section 3.2.4.1). Ces forces électriques apparaissent dans les équations de conservation de quantité de mouvement et de l'énergie; elles sont calculées à partir du modèle de transport des espèces chargées. Un terme supplémentaire de diffusion électrique doit être ainsi considéré dans les équations de transport des espèces chargées.

Équation de conservation de la quantité de mouvement

En effet, lorsqu'un champ électrique est imposé à un gaz ionisé, une force électrique est exercée sur les espèces chargées présentes dans ce gaz. Cette force est déterminée à partir des composantes de l'intensité électrique, E_j , et les concentrations totales des espèces chargées, n_k , en se basant sur la loi de Coulomb (cf. section 3.2.2) :

$$F_j = \rho \sum_{k=1}^{N_c} Y_k f_{k,j} = \rho \sum_{k=1}^{N_c} S_k Y_k \frac{|q_k| E_j}{m_k} = \sum_{k=1}^{N_c} S_k |q_k| E_j n_k$$

La concentration de l'espèce chargée k en (part/m³) est définie par la relation :

$$n_k = \frac{\rho Y_k}{m_k}$$

S_k est négatif ($= -1$) si l'espèce est chargée négativement et positif ($= +1$) si l'espèce est chargée positivement. N_c représente le nombre d'espèces chargées transportées, q_k : la charge électrique de l'espèce k et m_k : la masse moléculaire de l'espèce k .

Dans notre cas, comme nous verrons par la suite, seules des particules monochargées sont considérées ($|q_k| = e = 1,602 \times 10^{-19}$ C); on retrouve donc que la flamme dans son ensemble

est soumise à la force électrique :

$$\vec{F} = e \vec{E} (n^+ - n^-) \quad (5.1.1)$$

où les exposants + et - dénotent, respectivement, les propriétés des porteurs de charge positive et négative.

En conséquence, l'équation de bilan pour la quantité de mouvement, en présence de champ électrique, s'écrit de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + e E_j (n^+ - n^-) \quad (5.1.2)$$

Équation de conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie totale non chimique s'exprime sous la forme :

$$\frac{\partial \rho E_t}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i E_t}{\partial x_i} = \dot{\omega}_T - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial (\tau_{ij} - p \delta_{i,j}) u_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^{N_c} Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) \quad (5.1.3)$$

La contribution de la force électrique dans l'équation de transport de l'énergie peut donc être définie ainsi :

$$f = \rho \sum_{k=1}^{N_c} Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}) = \sum_j^{j=x,y,z} \sum_{k=1}^{N_c} S_k e E_j n_k (u_j - \frac{D_k}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + S_k \kappa_k E_j) \quad (5.1.4)$$

L'impact de cette contribution n'est pas significatif puisque le champ électrique appliqué dans les simulations est très faible par rapport à la variation de l'énergie totale, mais elle est, néanmoins, incluse dans le modèle. L'effet Joule est bien pris en compte dans l'équation (5.1.3) ; il correspond au terme en E^2 mis en évidence dans l'équation (5.1.4).

Équation de conservation des espèces

Comme on a vu précédemment (sections 2.3.1.2 et 3.2.5), l'équation de conservation de la masse de l'espèce k dans un milieu réactif s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho (u_j + V_j^C) Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho Y_k V_{k,j}}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (5.1.5)$$

L'expression de la vitesse de diffusion, $V_{k,j}$, dépend de la nature électrique de l'espèce k . Pour les espèces neutres, le flux de diffusion est simplement représenté par la loi de Fick avec un

Chapitre 5. Description du modèle mathématique

nombre de Schmidt, Sc , constant et égal à 0.7.

$$\rho Y_k V_{k,j} = -\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad \text{et} \quad D_k = D = \frac{\mu}{\rho Sc}$$

Pour les espèces chargées, un flux massique de diffusion électrique supplémentaire dû à la mobilité électrique (cf. section 3.2.5), κ , doit être considéré dans les équations de transport et la relation suivante est utilisée :

$$\rho Y_k V_{k,j} = -\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} + S_k \rho \kappa_k Y_k E_j \quad (5.1.6)$$

Lorsque l'on utilise une loi de Fick pour décrire le flux de diffusion des espèces, une vitesse de correction doit être ajoutée pour assurer la conservation de la masse globale comme montré dans la section 2.3.1.2 :

$$V_j^C = \sum_{k=1}^{N_{spe}} D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^{N_c} S_k \kappa_k Y_k E_j$$

N_{spe} représente ici le nombre total des espèces (neutres et chargées) composant le mélange gazeux.

Équation de l'intensité électrique

Il résulte des équations précédentes la nécessité de résoudre l'intensité électrique locale. À l'aide de l'application du théorème de Gauss (cf. section 3.2.3), on trouve que l'intensité du champ électrique est liée au potentiel électrique, V , par la simple équation différentielle :

$$E_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (5.1.7)$$

Équation de Poisson pour le potentiel électrique

L'équation de Poisson, présentée dans la section 3.2.3, décrivant la répartition du potentiel électrique, qui évolue dans le temps avec les concentrations des espèces chargées, doit donc être résolue à chaque pas de temps :

$$\nabla^2 V = -e \frac{(n^+ - n^-)}{\epsilon_0} \quad (5.1.8)$$

En résumé, les équations, régissant le modèle électro-hydrodynamique développé dans cette étude sont celles de conservation de masse (éq.2.3.5), de quantité de mouvement (éq.5.1.2),

5.2 Propriétés de transport des espèces chargées

de l'énergie (éq.5.1.4) et des espèces chimiques (neutres et chargées) (éq.2.3.7), couplées à des équations pour résoudre l'intensité électrique (éq.5.1.7) et le potentiel électrique (éq.5.1.8). L'approche retenue ici est très similaire à celle recommandée par Hu et al. [74] et Yamashita et al. [77] ou encore Huckaby et al. [93]. Dans cette approche, qui est souvent utilisée dans les problèmes de la mécanique de fluides, on considère que toutes les espèces peuvent être considérées comme se déplaçant à une seule vitesse barycentrique. En présence d'un champ électrique, une deuxième approche plus compliquée qui considère séparément les vitesses des espèces neutres et celles des espèces chargées peut être utilisée (cf. section 3.2.4.2). On a alors plusieurs vitesses de référence : la vitesse barycentrique des particules neutres, celle des ions et celle des électrons. En particulier, on peut signaler la mise en évidence d'une force proportionnelle au taux de production des espèces chargées [114, 115] dans la seconde approche qui n'apparaît pas dans le premier formalisme (éq.3.2.20). Les deux approches peuvent paraître très différentes. Cependant, la différence n'est en fait qu'apparente ; chaque formalisme des équations de conservation est associé à des situations physiques différentes. Dans le cas d'un gaz faiblement ionisé par exemple, la première approche concerne des milieux avec des champs électriques très faibles ou nuls alors que la seconde est destinée à des milieux où le champ électrique est plus important.

5.2 Propriétés de transport des espèces chargées

Le processus de diffusion des espèces chargées (éq.5.1.6) induit un terme de diffusion moléculaire exprimé par la loi de Fick, et un second terme de diffusion électrique dû à la mobilité électrique des espèces chargées. La description du transport des ions et des électrons par diffusion implique donc la détermination de leurs coefficients de diffusion moléculaire et de leurs mobilités électriques. Les valeurs de ces coefficients, en particulier celle de la mobilité électrique, influencent fortement la répartition des espèces chargées, et par conséquent elles impactent directement la valeur de la force électrique contrôlant l'intensité du vent ionique. Donc, il convient d'être prudent dans le choix de leurs valeurs, puisque la réponse de flamme au champ électrique pourrait y être sensible. Toutefois, les informations décrivant les propriétés de transport des espèces chargées dans les gaz constituant les flammes sont rarement abordées.

Non seulement peu d'études existent sur la mesure de la mobilité électrique des espèces chargées dans les flammes, mais aussi les résultats manquent de précision et sont différents d'une étude à une autre. Les auteurs [164] ont obtenu, par exemple, une valeur d'environ 1 ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$) pour l'ion Na^+ dans la zone des gaz brûlés d'une flamme atmosphérique, ainsi ils ont déterminé une valeur de mobilité électronique variant dans un intervalle de 2450 à 3900

Chapitre 5. Description du modèle mathématique

($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$). Dans une étude postérieure, Kinbara et al. [165] ont mesuré la mobilité des ions positifs dans une flamme plane de diffusion d'hydrocarbure brûlant à pression atmosphérique ; ils ont constaté une valeur qui diminue régulièrement de 0,8 dans la région du front du flamme à 0,5 dans les suies et arrivant à 0,1 ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$) dans la zone non-lumineuse des gaz brûlés. Une valeur de 0,8 ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$) a été également mesurée, par la méthode de la sonde électrique, dans les travaux [166] concernant les flammes méthane/air. D'autres auteurs [167–169] ont mesuré la mobilité électrique des particules de suie chargées ; ils ont trouvé que la mobilité dépend de l'intensité du champ électrique appliqué à la flamme et de la taille des particules chargées.

En général, la mobilité électrique des ions est prise constante pour un mélange gazeux donné [170]. Une valeur d'environ 1 ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1}$) est habituellement utilisée pour quantifier la mobilité des ions dans les flammes [4, 8], mais il est nécessaire de garder à l'esprit qu'elle est, dans le meilleur des cas, une valeur très moyenne puisqu'elle ne prend pas en compte l'évolution avec l'intensité du champ électrique, la température et la composition du mélange gazeux. La détermination exacte de l'expression de la mobilité des ions ou des électrons dans les flammes est hors de la portée de la présente étude. Cependant, des tests de sensibilité des résultats au choix de son expression sont réalisés et seront présentés dans la section 7.9. La valeur recommandée par Fialkov [4] dans sa revue est utilisée dans la majorité des simulations :

$$\kappa^i = 1 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$$

Les deux autres valeurs, testées pour étudier l'impact du choix de la mobilité électrique sur les résultats, sont :

- La valeur mesurée par Kinbara et al. [165] dans la région du front de flamme :

$$\kappa^i = 0,8 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$$

- La valeur utilisée généralement pour décrire la mobilité de l'espèce H_3O^+ [171], qui représente l'ion majoritaire dans les flammes du méthane stœchiométriques, dans l'air :

$$\kappa^i = 2,8 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$$

le rapport entre les mobilités électronique et ionique dans un mélange gazeux, faiblement ionisé et soumis à de faibles champs électriques, peut être [111] approximé par la relation :

$$\frac{\kappa^e}{\kappa^i} = \sqrt{\frac{m^i}{m^e}}$$

5.3 Mécanisme de la cinétique chimique

Cette dernière relation est utilisée dans les simulations pour calculer la mobilité des électrons :

$$\kappa^e = \left(\frac{\bar{m}}{m^e} \right)^{0.5} \kappa^i$$

m^e et \bar{m} représentent respectivement la masse de l'électron et la masse moyenne du mélange gazeux définie par :

$$\bar{m} = \left(\aleph \sum_k^{N_{spe}} \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1}$$

où ($\aleph = 6,022 \times 10^{23} \text{ mole}^{-1}$) est le nombre d'Avogadro.

Dans ce travail, comme dans la majorité des études s'intéressant à la modélisation de la chimie des ions dans les flammes [68, 73, 77, 93], le coefficient de diffusion des ions est approximé par le coefficient de diffusion des neutres :

$$D^i = D = \frac{\mu}{\rho Sc}$$

Par ailleurs, la relation d'Einstein [111] est utilisée pour déterminer le coefficient de diffusion des électrons :

$$D^e = \frac{KT}{e} \kappa^e$$

5.3 Mécanisme de la cinétique chimique

5.3.1 Revue des cinétiques

Bien que la chimie des ions dans les flammes ait reçu beaucoup d'intérêt du point de vue expérimental, seules quelques publications, visant à quantifier les mécanismes réactionnels ioniques en utilisant les simulations numériques, apparaissent dans la littérature. Une description des principaux modèles existants est réalisée dans ce qui suit.

Un modèle décrivant la formation et la composition des ions dans les flammes de prémélange monodimensionnelles d'acétylène a été proposé dans les travaux de Brown et Eraslan[68, 69]. L'objectif principal de ces études était de compiler un mécanisme réactionnel ionique détaillé et de le valider par comparaison avec les données expérimentales. Le modèle regroupe un ensemble de réactions ioniques (chemi-ionisation, transfert de proton, ion/molécule, recombinaison) avec une cinétique chimique appropriée à la combustion d'acétylène. Globalement, douze ions positifs sont inclus et les ions négatifs sont exclus. La production et la transformation de ces ions sont décrites par un mécanisme de la cinétique chimique se composant de 62 réactions, où plu-

sieurs taux de réaction sont estimés aux mieux à cause du manque de données expérimentales. Dans le calcul des flammes de prémélange, les ions diffusent de la même façon que les espèces lourdes avec des coefficients de diffusion correspondant à ceux des neutres. La simulation a montré un bon accord avec l'expérience en terme de prédiction de la concentration totale des ions positifs dans un large intervalle de richesses pauvres et proches de la stœchiométrie, si seul le CHO^+ produit dans la réaction de chemi-ionisation (éq.2.4.15) est pris comme ion primaire. Par contre, il a été conclu que certaines réactions de chemi-ionisation additionnelles doivent être utilisées pour les flammes riches en carburant. Par ailleurs, alors que les simulations prédisent raisonnablement la concentration ionique maximale qui est très sensible à la vitesse de la réaction de chemi-ionisation (éq.2.4.15), les profils des espèces ne sont en accord qualitatif que dans le cas stœchiométrique.

Postérieurement, dans une autre publication [73] du même groupe de recherche, la chimie des ions dans des flammes de méthane pauvres, stœchiométriques et riches brûlant à pression atmosphérique a été étudiée numériquement. Cinq ions positifs sont inclus, mais encore une fois les ions négatifs sont exclus du mécanisme qui est composé de 13 réactions ioniques. La procédure de calcul a consisté à résoudre une équation de Poisson pour évaluer l'intensité locale de champ électrique ambipolaire généré naturellement dans la flamme à cause de la présence des espèces chargées. L'intensité de champ électrique résultante est ensuite utilisée pour calculer les contributions des courants ioniques dans les flux de la masse globale des ions. Dans cette approche, la diffusion et la mobilité des ions sont deux processus distincts. Les coefficients de diffusion des ions sont pris égaux à ceux des neutres. Les auteurs ont comparé la performance de leur mécanisme aux mesures expérimentales concernant quatre flammes de prémélange, laminaires et monodimensionnelles. Alors que les espèces neutres majoritaires sont bien reproduites, les profils des espèces chargées ne sont en accord avec l'expérience que qualitativement. Par exemple, pour le H_3O^+ , qui a la concentration la plus élevée, les valeurs maximales sont sous-estimées avec un facteur d'au moins deux par rapport à l'expérience.

Plus récemment, en se basant notamment sur les travaux expérimentaux de Goodings [71, 72], Prager [76, 172] a simulé la combustion d'une flamme méthane/oxygène, plane et pauvre en incluant 10 espèces ioniques : 4 cations et 6 anions et des électrons libres. Cette expérience a été utilisée pour l'évaluation des simulations, puisqu'elle offre la base de données la plus détaillée de la littérature. Un mécanisme de la cinétique chimique de 208 réactions impliquant 38 espèces neutres est utilisé pour décrire l'oxydation du méthane. Les ions, observés dans l'expérience de Goodings et ses coauteurs [71, 72] comme les plus dominants, sont ajoutés au modèle chimique. Leur mécanisme réactionnel est décrit par 65 réactions ioniques réversibles. L'approche présentée est similaire à la méthodologie employée dans les travaux pré-

cédents [68, 69, 73]. Mais contrairement à ces derniers travaux, les anions sont pris en compte dans la simulation. En plus, la diffusion ambipolaire des espèces chargées a été directement représentée dans le modèle et par conséquent aucune équation différentielle partielle pour le champ électrique n'est résolue. Leur simulation a reproduit raisonnablement les répartitions et les concentrations des cations, mais présente des erreurs importantes pour les anions (cf. chapitre 6). Il a été conclu qu'il est important de prendre en compte à la fois les espèces chargées positives et négatives.

D'autres approches pour modéliser la chimie des ions dans les flammes peuvent être trouvées dans la littérature. Par exemple, Starik et Titova [173] décrivent un mécanisme détaillé de la cinétique des ions lors de la combustion du méthane et de l'hydrogène avec l'air ; ce mécanisme comprend environ 214 réactions incluant des ions positifs et négatifs. Hu et al. [74] et Yamashita et al. [77], qui ont étudié l'interaction entre le champ électrique et la combustion, ont employé des mécanismes avec moins de réactions, respectivement 31 (28 pour les neutres et 3 pour les ions) et 39 (28 pour les neutres et 11 pour les ions) et ont négligé les ions négatifs.

5.3.2 Cinétique des espèces neutres

Les espèces neutres servent à produire et à transformer les espèces chargées se présentant avec de très faibles concentrations dans les flammes ; par conséquent, leur prédiction précise est une condition préalable nécessaire pour déterminer une répartition ionique correcte. Une cinétique chimique réduite, comme celle utilisée par les auteurs [73, 74, 76, 77], peut contraindre cette exigence et conduire à une prédiction erronée des espèces chargées.

Parmi les caractéristiques du problème considéré, on souligne donc la nécessité de prendre en compte une chimie détaillée. Cependant, les mécanismes des cinétiques détaillés des hydrocarbures contiennent généralement de nombreuses espèces et réactions. L'utilisation directe des mécanismes détaillés implique le calcul des concentrations de toutes les espèces pour chaque nœud de maillage. Cette opération est pratiquement impossible pour des configurations autre que 0D et 1D, de fait des limites en temps de calcul et en capacités de mémoire. Pour contrer cette difficulté, l'utilisation de la chimie tabulée semble une approche intéressante.

Dans ce travail, le mécanisme très détaillé GRI 3.0 [44] qui contient 325 réactions et 53 espèces neutres (cf. section 2.3.2) est retenu pour décrire la chimie des substances neutres. Le GRI-MECH 3.0 est choisi, puisqu'il est optimisé pour la combustion des flammes de méthane étudiées ici (cf. chapitres 6 et 7). Ce mécanisme est combiné avec un ensemble de réactions ioniques qui sera détaillé par la suite (cf. section 5.3.3.1). L'hypothèse faite ici est que la concentration de n'importe quelle espèce neutre présente dans le mécanisme est toujours très

supérieure aux concentrations des espèces chargées. Par conséquent, la production/disparition des espèces chargées est supposée n'avoir aucun impact sur les concentrations des espèces neutres.

L'intégration du mécanisme détaillé GRI 3.0 impose des pas de temps et spatial très petits. Conséquemment, une approche de la chimie tabulée, appelée FPI « Flame Prolongation of ILDM » (cf. Section 2.3.2.2), est employée. Dans cette approche, la combustion impliquant les espèces neutres est décrite avec une chimie tabulée contrôlée par deux paramètres : la fraction du mélange, Z , et la variable d'avancement, Y_c , [53, 174]. Pour construire la tabulation, une bibliothèque de flammes méthane/air prémélangées de différentes richesses a été générée par le programme CHEMKIN avec le mécanisme GRI 3.0 [44]. Au-delà des limites d'inflammabilité, les fractions massiques des espèces tabulées sont prolongées linéairement dans l'espace de la fraction de mélange, côté pauvre jusqu'en $Z = 0$ et côté riche jusqu'en $Z = 1$. Les concentrations des espèces neutres, Y_k , et le terme source de dégagement de la chaleur, $\dot{\omega}_T$, sont directement extraits de la table chimique en fonction des valeurs locales de la fraction du mélange et de la variable d'avancement. Ces simplifications permettent de décrire la chimie de combustion des espèces neutres en résolvant seulement deux équations de transport supplémentaires :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Z}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j}) \quad (5.3.9)$$

$$\frac{\partial \rho Y_c}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho D \frac{\partial Y_c}{\partial x_j}) + \dot{\omega}_c \quad (5.3.10)$$

La variable d'avancement est définie par : $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$ [58] et son terme source est également obtenu à partir de la même table, $\dot{\omega}_c(Z, Y_c)$.

5.3.3 Cinétique des espèces chargées

Pour les espèces chargées, un mécanisme simplifié comprenant 40 réactions ioniques et 28 substances chimiques, dont 5 chargées, est adopté (voir les tableaux 5.2 et 5.3). Les termes source des espèces chargées, $\dot{\omega}_k$, sont calculés par une loi d'Arrhenius (cf. section 5.3.3.2) à partir des concentrations des espèces neutres participant aux réactions ioniques et extraites de la table chimique. L'hypothèse sous-jacente est que les espèces chargées n'ont aucun impact sur la chimie des espèces neutres. Ceci peut être justifié par la très faible concentration molaire des espèces chargées par rapport à la plus petite concentration molaire des radicaux neutres (C, CH, ...) impliqués dans les réactions ioniques. Par exemple, dans toutes les simulations présentées dans ce mémoire, le ratio de la concentration maximale des ions positifs par rapport

à la concentration maximale de n'importe quel radical impliqué dans les réactions ioniques est égal au maximum à environ : 0,015.

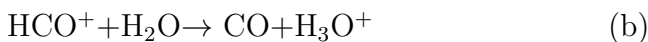
5.3.3.1 Processus chimique

Le mécanisme réactionnel des espèces chargées développé lors de cette étude est décrit dans cette section. Il est principalement constitué des réactions proposées dans les travaux de Prager et al. [76] et Goodings et al. [70–72]. Ces travaux offrent une base de données importante sur le processus chimique et les taux de réactions des ions dans les flammes de méthane.

5.3.3.1.1 Ions positifs Dans les flammes, les cations, les anions et les électrons sont produits par un mécanisme de chemi-ionisation. La source des ions dans les flammes d'hydrocarbures est largement acceptée pour être la réaction (cf. section 2.4) :



Selon Goodings et al. [71], ce premier cation subit des réactions de transfert de protons et se transforme rapidement en un autre cation (H_3O^+) plus abondant dans les flammes via :



Cette réaction se produit quasi instantanément et implique un très petit pas de temps caractéristique. On peut alors négliger le transport du cation HCO^+ en supposant qu'il se transforme immédiatement en H_3O^+ . Des tests avec et sans cette hypothèse ont été réalisés conduisant à un écart maximal de seulement 0,1% entre les profils des concentrations totales des ions positifs (Tableau 5.1). La figure 5.1 représente les profils de concentration totale des ions positifs et ceux de cation HCO^+ dans une flamme brûlant le méthane avec de l'air à trois richesses différentes. On remarque, dans tous les cas, aucune différence entre la répartition des ions positifs prenant en compte le transport de HCO^+ et celle négligeant son transport. Ceci est justifié par la très faible contribution de HCO^+ dans la charge totale positive (environ 0,05 %).

Le deuxième type important de réactions impliquant des ions positifs est un nombre de réactions de recombinaison des électrons menant à la dissociation du cation H_3O^+ . Ces réactions sont supposées être responsables de la diminution lente de la concentration du H_3O^+ dans les gaz brûlés. Prager et al. [76] ont proposé de retenir quatre réactions :



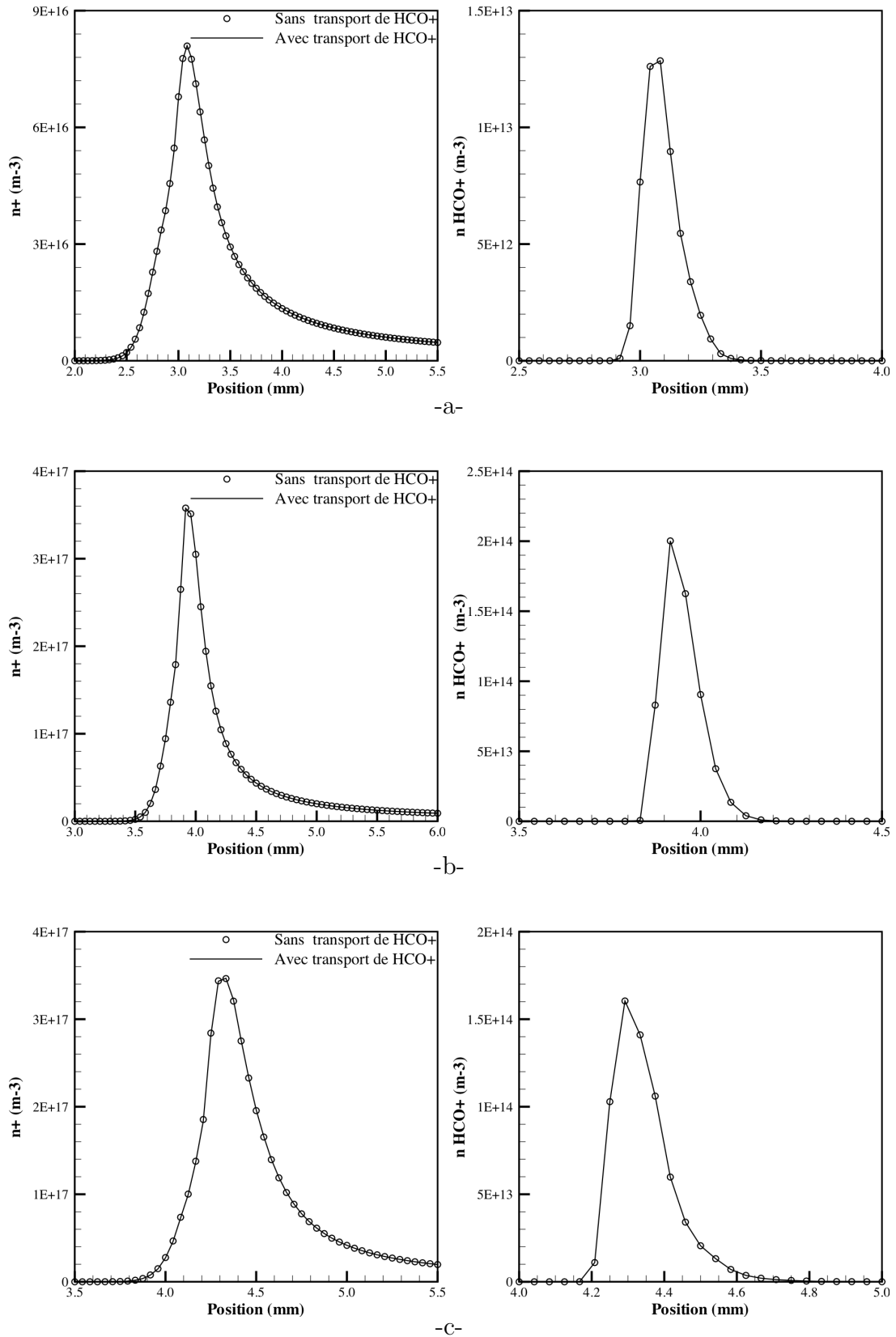


Figure 5.1 – Concentration totale des : (droite) ions positifs sans et avec transport de HCO^+ , (gauche) HCO^+ , dans une flamme méthane/air 1D prémélangée pour : (a) $\phi = 0,7$, (b) $\phi = 1,0$ et (c) $\phi = 1,2$.

5.3 Mécanisme de la cinétique chimique

		Avec transport de HCO ⁺	Sans transport de HCO ⁺	Différence %
n ⁺ (m ⁻³)	$\phi = 0,7$	$8,091 \times 10^{16}$	$8,083 \times 10^{16}$	$\sim 0,1$
	$\phi = 1,0$	$3,559 \times 10^{17}$	$3,561 \times 10^{17}$	$\sim 0,1$
	$\phi = 1,2$	$3,465 \times 10^{17}$	$3,461 \times 10^{17}$	$\sim 0,1$
n ^e (m ⁻³)	$\phi = 0,7$	$7,322 \times 10^{16}$	$7,322 \times 10^{16}$	$\sim 0,0$
	$\phi = 1,0$	$3,459 \times 10^{17}$	$3,459 \times 10^{17}$	$\sim 0,0$
	$\phi = 1,2$	$3,427 \times 10^{17}$	$3,421 \times 10^{17}$	$\sim 0,2$
n ^{anion} (m ⁻³)	$\phi = 0,7$	$2,818 \times 10^{16}$	$2,815 \times 10^{16}$	$\sim 0,1$
	$\phi = 1,0$	$6,698 \times 10^{16}$	$6,683 \times 10^{16}$	$\sim 0,2$
	$\phi = 1,2$	$5,508 \times 10^{16}$	$5,497 \times 10^{16}$	$\sim 0,2$
n ^{HCO⁺} (m ⁻³)	$\phi = 0,7$	$1,282 \times 10^{13}$		
	$\phi = 1,0$	$1,990 \times 10^{14}$		
	$\phi = 1,2$	$1,600 \times 10^{14}$		

Tableau 5.1 – Valeurs de concentration ionique totale maximale, avec et sans transport de HCO⁺, dans une flamme méthane/air 1D prémélangée.



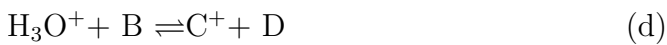
D'autres auteurs [68, 73, 74, 77, 93] ont supposé que la réaction (c-1) est la plus dominante et proposent de négliger (c-2), (c-3) et (c-4). Dans notre modèle, une seule réaction globale est retenue :



Pour décrire la vitesse de cette réaction, le taux global de la recombinaison des cations avec les électrons mesuré par Peeters et al. [82] est utilisé :

$$k_{\text{recombinaison}} = 1,144 \times 10^{17} \text{ (cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$$

D'un autre côté, en conséquence des réactions ion/molécule, le H₃O⁺ forme d'autres ions positifs minoritaires :



qui ne seront pas inclus dans le modèle. En effet, nous notons que chaque molécule de H₃O⁺, qui réagit avec une molécule neutre B, donne un autre cation C⁺. Cela signifie que la quantité to-

La densité des ions positifs est égale à celle de l'ion H_3O^+ avant sa transformation en d'autres espèces positives. Par ailleurs, en supposant que tous les ions ont pratiquement les mêmes coefficients de transport (mobilité électrique et coefficient de diffusion), la densité locale de la charge totale positive sera identique si toutes les espèces positives chargées sont transportées ou si seulement le H_3O^+ est transporté. En conséquence, le cation H_3O^+ peut être considéré comme le seul transporteur de la charge positive.

Les étapes précédentes constituent le processus chimique retenu dans cette étude pour représenter la production et la conversion des ions positifs. Le diagramme de ces étapes est schématisé sur la figure 5.2 :

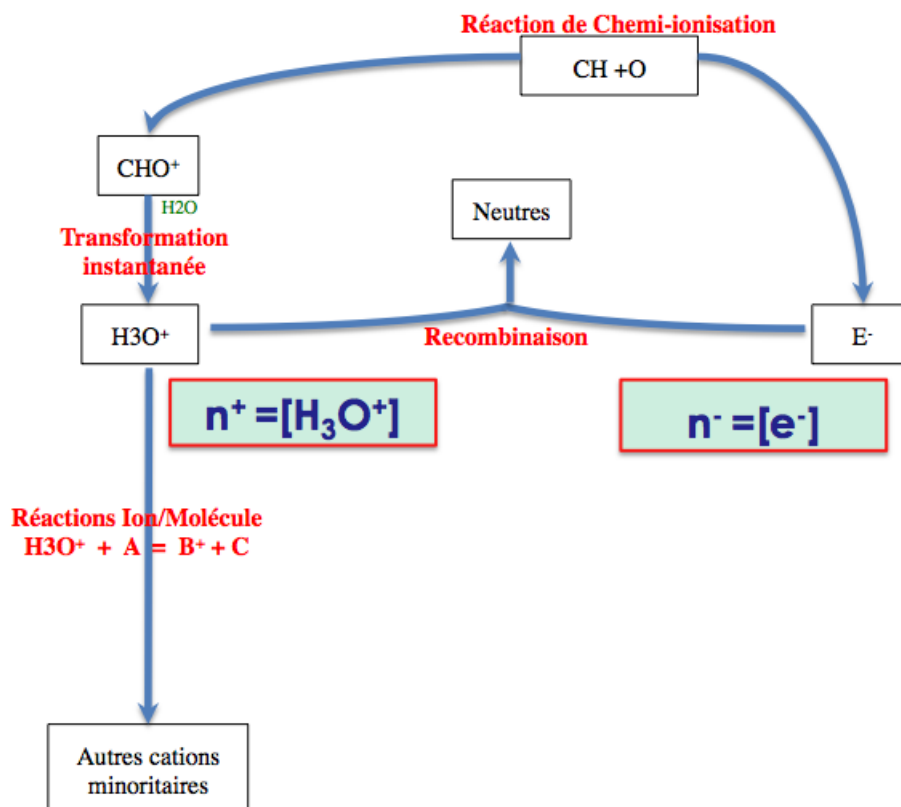


Figure 5.2 – Schéma du processus chimique des ions positifs.

5.3.3.1.2 Ions négatifs Peu d'informations sur la chimie des anions sont présentes dans la littérature et les estimations d'erreur sont beaucoup plus grandes que pour les réactions des cations. Le mécanisme réactionnel des ions négatifs développé dans ce travail est une compilation de plusieurs sources. En particulier, les principales réactions qui ont été discutées par Goodings [71, 72] et Prager [76] sont incluses.

5.3 Mécanisme de la cinétique chimique

Comme vu précédemment dans les sections 2.4 et 5.3.1, les électrons sont généralement considérés comme le seul porteur de charge négative dans les flammes [68, 69, 73–75, 77, 93]. Cependant, les mesures expérimentales de Goodings [71, 72] et la simulation numérique de Prager [76] ont montré que l'attachement des électrons aux molécules d'oxygène, pour produire les premiers anions, est un processus majeur dans la région de basses températures située en amont de la zone de réaction, et donc qu'il est important d'en tenir compte dans les modèles décrivant la chimie des ions dans les flammes.

D'après ces travaux, les électrons produits par un processus de chemi-ionisation s'attachent aux molécules électronégatives⁵ d'oxygène via des réactions de trois corps réversibles :



Ces considérations établissent le O_2^- comme l'ion négatif initial.

D'un autre côté, les électrons sont également produits dans un bain de molécules pouvant attirer les électrons, tels O et OH, avec lesquels ils s'attachent via un processus à trois corps pour former les anions secondaires O^- et OH^- :



Une réaction dans le mécanisme contenant un troisième corps (M) représente un certain nombre de réactions individuelles, qui en résultent si l'on substitue le troisième corps M par le nom d'une espèce susceptible de participer dans cette réaction (voir tableau 5.2).

Selon Goodings et al. [72], les deux derniers anions, O^- et OH^- , peuvent également être produits à partir de l'anion primaire O_2^- par des réactions de transfert de charge :



Le troisième type important de réactions, qui concernent les ions négatifs, est représenté par les réactions de détachement associatif des électrons. Il représente un processus considérable dans la perte d'anions dans les flammes :

5. Molécule d'une grande capacité à attirer les électrons lors de la formation d'une liaison chimique avec une autre substance

Chapitre 5. Description du modèle mathématique



Pour quantifier d'une manière correcte cette perte, les réactions de transfert de charge impliquant un réarrangement entre les ions négatifs, O_2^- , O^- et OH^- , doivent donc également être considérées :



À partir des réactions ion/molécule, les anions primaires O_2^- , O^- et OH^- forment d'autres anions :



Ces anions recombinent avec quelques cations minoritaires via :



Néanmoins, ces anions ne seront pas inclus dans le modèle. En effet, comme pour les cations, en faisant l'hypothèse que tous les ions négatifs ont pratiquement les mêmes propriétés de transport, la charge totale locale négative, n^- , qui nous intéresse pour déterminer l'intensité du vent ionique (éq.5.1.1), ne serait pas trop différente si on transportait tous les anions autres que : O_2^- , O^- et OH^- . De même, la recombinaison anions/cations peut être négligée à cause de la faible concentration des ions positifs qui y participent.

Les réactions décrites précédemment et constituant le mécanisme chimique des espèces chargées employé dans cette étude sont schématisées sur la figure 5.3. Ces réactions sont présentées d'un manière plus détaillée dans la tableau 5.2. Dans la mesure de disponibilité des données, les taux de réactions, leurs incertitudes et la gamme de température pour laquelle ils ont été obtenus sont donnés conjointement avec la référence.

Réaction	A	n	E_a	Temp	Incertitude	réf
	$\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ (ou) $\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$		kJ/mol	K		
Réaction de chemi-ionisation						
$\text{CH} + \text{O} \rightleftharpoons \text{CHO}^+ + \text{E}^-$	$2,512 \times 10^{11}$	0,0	7,120	10-1750		[175, 176]

5.3 Mécanisme de la cinétique chimique

Réactions de transfert de proton						
$\text{CHO}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{H}_3\text{O}^+ + \text{CO}$	$1,506 \times 10^{15}$	0,0	0,000	10-41000	<25%	[176]
Réaction de recombinaison dissociative des électrons						
$\text{H}_3\text{O}^+ + e^- \rightleftharpoons \text{Espèces neutres}$	$1,144 \times 10^{17}$	0,0	0,000			[82]
Réactions d'attachement des électrons						
$\text{O}_2 + e^- + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2^- + \text{O}$	$3,627 \times 10^{16}$	0,0	0,000			[177]
$\text{O}_2 + e^- + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2^- + \text{O}_2$	$1,523 \times 10^{21}$	-1,0	4,989			[177]
$\text{O}_2 + e^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{O}_2^- + \text{H}_2\text{O}$	$5,077 \times 10^{18}$	0,0	0,000			[177]
$\text{O}_2 + e^- + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{O}_2^- + \text{N}_2$	$3,590 \times 10^{21}$	-2,0	0,582			[177]
$\text{OH} + e^- + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{H}_2$	$1,088 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{OH} + e^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{H}_2\text{O}$	$6,528 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{OH} + e^- + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{O}_2$	$0,435 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{OH} + e^- + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{N}_2$	$0,435 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{OH} + e^- + \text{CO} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{CO}$	$0,816 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{OH} + e^- + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{CO}_2$	$1,632 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{OH} + e^- + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{CH}_4$	$3,264 \times 10^{17}$	0,0	0,000		facteur 10	[178]
$\text{O} + e^- + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{O}^- + \text{O}_2$	$3,627 \times 10^{16}$	0,0	0,000			[177]
$\text{O} + e^- + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}^- + \text{O}$	$3,021 \times 10^{17}$	0,0	0,000			[179]
Réactions de transfert de charge						
$\text{O}_2^- + \text{OH} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{O}_2$	$6,022 \times 10^{13}$	0,0	0,000			[178]
$\text{O}_2^- + \text{O} \rightleftharpoons \text{O}^- + \text{O}_2$	$1,987 \times 10^{14}$	0,0	0,000			[177]
Réactions de transfert de charge avec réarrangement						
$\text{O}_2^- + \text{H} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{O}$	$1,084 \times 10^{15}$	0,0	0,000			[179]
$\text{O}^- + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{H}$	$1,987 \times 10^{13}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{O}^- + \text{CH}_4 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{CH}_3$	$6,022 \times 10^{13}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{O}^- + \text{H}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{OH}$	$8,431 \times 10^{14}$	0,0	0,000			[177]
$\text{O}^- + \text{CH}_2\text{O} \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{HCO}$	$5,601 \times 10^{14}$	0,0	0,000			[180]
$\text{O}^- + \text{C}_2\text{H}_6 \rightleftharpoons \text{OH}^- + \text{C}_2\text{H}_5$	$6,130 \times 10^{15}$	- 0,5	0,000			[173]
Réactions de détachement associatif des électrons						
$\text{O}_2^- + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}_2 + e^-$	$6,022 \times 10^{14}$	0,0	0,000			[76]
$\text{O}_2^- + \text{H} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + e^-$	$7,226 \times 10^{14}$	0,0	0,000		<facteur 3	[179]
$\text{OH}^- + \text{O} \rightleftharpoons \text{HO}_2 + e^-$	$1,204 \times 10^{14}$	0,0	0,000	300	50%	[180]
$\text{OH}^- + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + e^-$	$1,084 \times 10^{15}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{OH}^- + \text{C} \rightleftharpoons \text{HCO} + e^-$	$3,001 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{OH}^- + \text{CH} \rightleftharpoons \text{CH}_2\text{O} + e^-$	$3,001 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{OH}^- + \text{CH}_3 \rightleftharpoons \text{CH}_3\text{OH} + e^-$	$6,022 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{O}^- + \text{C} \rightleftharpoons \text{CO} + e^-$	$3,011 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{O}^- + \text{H} \rightleftharpoons \text{OH} + e^-$	$3,011 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{O}^- + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + e^-$	$4,215 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$\text{O}^- + \text{CH} \rightleftharpoons \text{HCO} + e^-$	$3,011 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]

Chapitre 5. Description du modèle mathématique

$O^- + CH_2 \rightleftharpoons CH_2O + e^-$	$3,001 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$O^- + CO \rightleftharpoons CO_2 + e^-$	$3,914 \times 10^{14}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$O^- + O \rightleftharpoons O_2 + e^-$	$8,431 \times 10^{13}$	0,0	0,000	10-41000	facteur 2	[176]
$O^- + C_2H_2 \rightleftharpoons CH_2CO + e^-$	$7,226 \times 10^{14}$	0,0	0,000	298	20%	[72]
$O^- + H_2O \rightleftharpoons H_2O_2 + e^-$	$3,613 \times 10^{11}$	0,0	0,000			[179]

Tableau 5.2 – Mécanisme réactionnel des espèces chargées.

Espèces neutres tabulées	Espèces chargées transportées
C, C ₂ H ₂ , C ₂ H ₅ , C ₂ H ₆ , CH, CH ₂ , CH ₂ CO, CH ₂ O, CH ₃ , CH ₃ OH, CH ₄ , CO, CO ₂ , H, H ₂ , H ₂ O, H ₂ O ₂ , HCO, HO ₂ , N ₂ , O, O ₂ , OH	H ₃ O ⁺ O ₂ ⁻ , OH ⁻ , O ⁻ , e ⁻

Tableau 5.3 – Tableau récapitulatif des espèces tabulées et transportées retenues dans le modèle chimique.

5.3.3.2 Calcul des termes source

Les réactions ioniques sont supposées être produites dans la phase gazeuse à un niveau moléculaire. Cela permet d'établir une loi de vitesse pour chaque réaction d'une manière facile, puisque l'ordre d'une réaction dans ce cas est égal à sa molécularité⁶. Les termes source massiques des espèces chargées, $\dot{\omega}_k$, peuvent donc être déterminés par l'utilisation des relations (éq.2.3.1) et (éq.2.3.2) :

$$\dot{\omega}_{k,r} = W_k(\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \left[k_{fr}(T) \prod_{k=1}^{N_p} [X_k]^{\nu'_{k,r}} - k_{br}(T) \prod_{k=1}^{N_p} [X_k]^{\nu''_{k,r}} \right] \quad (5.3.11)$$

$$\dot{\omega}_k = \sum_{r=1}^{R_{ionique}} \dot{\omega}_{k,r} \quad (5.3.12)$$

où N_p est le nombre d'espèces participant dans le mécanisme réactionnel des espèces chargées (23 espèces neutres et 5 espèces chargées).

6. Nombre d'entités moléculaires (ions, molécules) qui entrent simultanément en contact lors d'une réaction élémentaire.

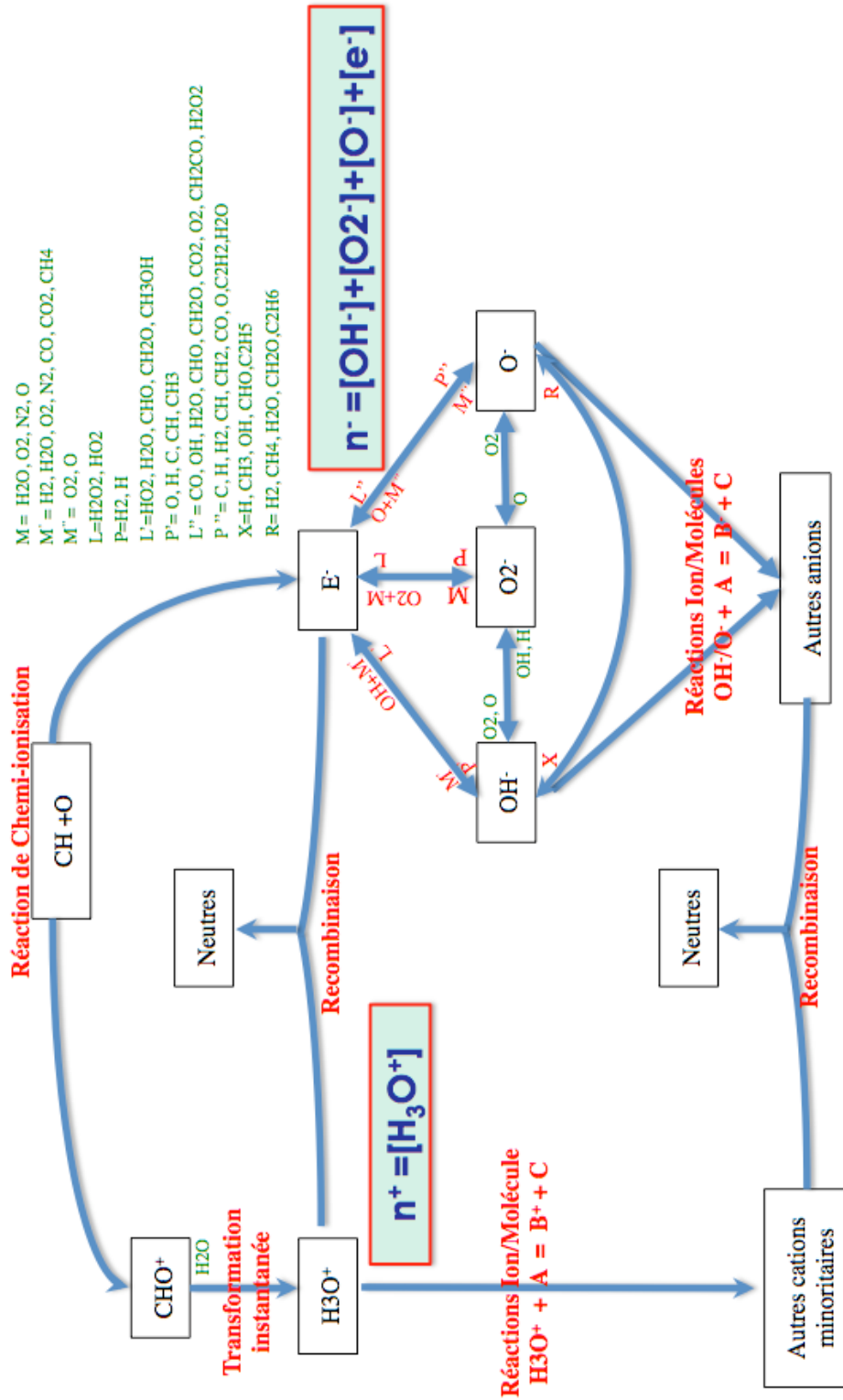


Figure 5.3 – Schéma du processus chimique des espèces chargées positives et négatives.

Une loi d'Arrhenius est appliquée pour calculer les vitesses des réactions directes (sens : réactifs \mapsto produits) :

$$k_{fr}(T) = A_r T_r^{n_r} \exp\left(\frac{-E_{a_r}}{RT}\right) \quad (5.3.13)$$

Les trois paramètres A_r , n_r et l'énergie d'activation E_{a_r} sont fournis pour toutes les réactions directes dans le tableau 5.2. Le facteur pré-exponentiel, A_r , a l'unité ($\text{cm}^3 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$) pour les réactions à deux corps et ($\text{cm}^6 \cdot \text{mol}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$) pour les réactions à trois corps.

La majorité des réactions impliquées sont considérées comme réversibles. les taux de réactions inverses (sens : produits \mapsto réactifs [Backward]) sont calculés à partir des taux directs (sens : réactifs \mapsto produits [Forward]) par l'utilisation des constantes d'équilibre thermodynamique (éq.2.3.4) :

$$k_{br}(T) = \frac{k_{fr}}{K_{cr}}$$

Ces constantes sont obtenues à partir de l'enthalpie libre molaire standard, $\Delta_r \bar{G}^0(T)$, par :

$$K_{cr}(T) = \left(\frac{p_0}{RT}\right)^{\sum_i (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r})} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_r \bar{G}^0(T)}{RT}\right)$$

5.3.3.3 Calcul des propriétés thermodynamiques

L'enthalpie libre standard⁷ de la réaction r , $\Delta_r \bar{G}^0(T)$, est calculée par l'utilisation de l'enthalpie, $\Delta_r \bar{H}^0(T)$, et de l'entropie, $\Delta_r \bar{S}^0(T)$, standard de réaction :

$$\Delta_r \bar{G}^0(T) = \Delta_r \bar{H}^0(T) - T \Delta_r \bar{S}^0(T)$$

Leurs valeurs sont obtenues par :

$$\Delta_r \bar{H}^0(T) = \sum_k^{N_p} (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \bar{H}_k^0(T)$$

$$\Delta_r \bar{S}^0(T) = \sum_k^{N_p} (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \bar{S}_k^0(T)$$

où \bar{H}_k^0 et \bar{S}_k^0 sont, respectivement, l'enthalpie et l'entropie standard de l'espèce k .

Dans les systèmes à pression constante obéissant à une loi des gaz parfaits, l'évolution de l'enthalpie ou de l'entropie de chaque espèce en fonction de la température peut être calculée

7. L'état standard d'un composé chimique est toujours défini pour 1 mol sous la pression $p_0 = 1 \text{ bar} = 10^5 \text{ Pa}$ dite pression standard.

à partir de la capacité thermique comme suit :

$$\bar{H}_k^0(T) = \bar{H}_{0_k} + \int_{T_0}^T \bar{C}_{pk}(T) dT$$

$$\bar{S}_k^0(T) = \bar{S}_{0_k} + \int_{T_0}^T \frac{\bar{C}_{pk}(T)}{T} dT$$

\bar{H}_{0_k} et \bar{S}_{0_k} dénotent, respectivement, l'enthalpie et l'entropie standard de l'espèce k mesurées à la température de référence : $T_0 = 298,15$ Kelvin.

Les capacités calorifiques sont calculées par des polynômes du quatrième ordre :

$$\frac{\bar{C}_{pk}(T)}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

L'enthalpie et l'entropie de chaque espèce se déterminent donc de la façon suivante :

$$\frac{\bar{H}_k^0(T)}{R} = a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 + \frac{a_5}{5} T^5 + a_6$$

$$\frac{\bar{S}_k^0(T)}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7$$

Les cinq constantes (a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) aussi bien que les deux constantes d'intégration (a_6, a_7), sont fournies, pour chaque substance participant dans le mécanisme réactionnel des espèces chargées, selon la formulation standard de la NASA [181] dans la base de donnée décrite dans l'annexe (A.1, page 201). Ces sept constantes sont données pour deux plages de température pour ajuster au mieux les variables thermodynamiques recherchées.

5.4 Procédure numérique

Il s'agira dans cette section, premièrement de présenter brièvement quelques informations sur le code de calcul « SitCom » utilisé dans cette étude, et deuxièmement de détailler les modifications apportées à ce code pour pouvoir modéliser l'effet du champ électrique sur la combustion.

5.4.1 Détails sur le code de calcul SiTCom

SiTCom (Simulating Turbulent Combustion) est un code de calcul parallèle MPI développé au sein du laboratoire CORIA par l'équipe de mécanique des fluides numériques. Il résout les

Chapitre 5. Description du modèle mathématique

équations de Navier-Stokes compressibles laminaires et turbulentes, dans leur formulation de type conservative, en 2D et 3D sur des maillages cartésiens structurés, par la méthode des volumes finis.

Ce solveur, qui est entièrement codé en FORTRAN 77, utilise un schéma numérique centré de 4^{ème} ordre : « skew-symmetric-like » proposé par Ducros et al.[182] pour discrétiser les termes convectifs, et un schéma centré de 4^{ème} ordre pour calculer les termes diffusifs. Des termes de dissipation artificielle d'ordre deux et quatre peuvent être ajoutés pour atténuer les modes hautes-fréquences et supprimer certaines oscillations [183, 184]. L'intégration temporelle est de type Runge-Kutta explicite 3^{ème} ordre [185, 186]. La gestion des conditions aux limites reprend la méthodologie NSCBC et 3D-NSCBC [187, 188]. Pour des informations plus spécifiques sur cette dernière approche comme sur les schémas numériques susmentionnés, la thèse de Lodato [189] constitue une base de référence. Des exemples d'applications DNS ou LES de SiTCom sont disponibles dans la littérature [11, 58, 60, 190–192] ou sur le site : <http://www.coria-cfd.fr/>.

5.4.2 Contributions apportées

L'objectif des modifications apportées au code est de rendre possible la modélisation de la réponse des flammes aux champs électriques. Ceci est réalisé par l'implémentation du modèle décrit précédemment selon les étapes suivantes :

Forces électriques :

Le solveur, dans sa version d'origine, peut être utilisé pour réaliser des simulations numériques directes des écoulements réactifs (flammes) et non-réactifs (écoulements à froid). Il résout l'ensemble des équations de Navier-stokes (masse, quantité de mouvement et énergie) couplées à une chimie tabulée de type FPI décrite par le transport de la variable d'avancement et de la fraction de mélange. Toutefois, afin d'étudier l'effet du vent ionique sur la stabilité des flammes, les contributions de la force électrique dans les équations de conservation de quantité de mouvement et de l'énergie doivent être considérées. Ces contributions sont calculées en utilisant les relations (équ.5.1.1) et (équ.5.1.4) et leurs valeurs sont ajoutées directement dans les équations de transport comme des termes source.

Intensité et potentiel électriques :

En effet, la force électrique s'écrit comme le produit de l'intensité et de la charge spatiale électriques. Sa résolution nécessite donc la détermination de l'intensité électrique. Cette dernière

est reliée au potentiel électrique par l'équation différentielle (éq.5.1.7). C'est pourquoi, une résolution de l'équation de Poisson pour le potentiel électrique (éq.5.1.8) doit être ajoutée au code de calcul. La discrétisation de ces équations est réalisée en se basant sur un schéma centré de 2^{ème} ordre. Le système algébrique des équations discrètes obtenu à partir de l'équation de Poisson est résolu par la méthode de l'algorithme itératif de Thomas (TDMA) [193] et sa convergence est obtenue à chaque pas de temps.

Transport des espèces chargées :

La détermination de la répartition de la force et du potentiel électriques nécessite le transport des espèces chargées constituant le mélange gazeux. Dans notre modèle de la chimie des ions, cinq espèces chargées sont retenues pour représenter les charges ioniques totales positive et négative du mélange. La dynamique de transport de ces espèces chargées est décrite par l'équation de conservation (éq.5.4.14) tenant compte des termes de flux de transport et de sources chimiques :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho(\vec{V} + \vec{V}^c) Y_k)}_{\text{convection}} = \overbrace{\nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k - S_k \rho \kappa_k Y_k E)}^{\text{diffusion (moléculaire + électrique)}} + \underbrace{\dot{\omega}_k}_{\text{terme source}} \quad (5.4.14)$$

Termes de transport : La discrétisation des flux de transport par convection et par diffusion moléculaire ou électrique est réalisée en se basant sur les schémas numériques déjà implémentés dans le solveur. C'est à dire, un schéma numérique centré de 4^{ème} ordre : « skew-symmetric-like » pour les termes convectifs, et un schéma centré de 4^{ème} ordre pour les termes diffusifs.

La contribution de la diffusion électrique due à la mobilité électrique des espèces chargées est ajoutée dans le calcul du flux de diffusion total impliquant un nouveau pas de temps contrôlé par deux paramètres, qui sont l'intensité du champ électrique et la mobilité électrique :

$$\Delta t \leq \left| \frac{\Delta}{u + S_k \kappa_k E} \right|$$

où Δ est l'espacement local de la grille de maillage.

À cause de leur mobilité électrique élevée, les électrons ont une vitesse de dérive relativement importante par rapport à celle des ions ($\kappa^e E \gg \kappa^i E$). En conséquence, le processus de transport des électrons par diffusion électrique, en particulier dans le cas des voltages les plus élevés, peut dominer le processus de convection pure. L'utilisation d'un schéma centré peut donc engendrer des instabilités numériques sur les profils des électrons et par conséquent sur les profils des autres ions transportés interdépendants (voir figure 5.4).

Chapitre 5. Description du modèle mathématique

Un schéma centré étant donc instable dans le cas des électrons, parce qu'insuffisamment diffusif, une discrétisation décentrée du terme $(S^{e^-} \kappa^{e^-} E \rho Y^{e^-})$ semble mieux adaptée et peut amortir les instabilités numériques. En effet, le dernier terme peut être décrit par le produit de la vitesse de dérive, $(S^{e^-} \kappa^{e^-} E)$, et le scalaire (ρY^{e^-}) . Ce qui signifie un transport convectif des électrons par le champ de vitesse de dérive. Donc, on a : si $(S^{e^-} \kappa^{e^-} E > 0)$ la convection transporte le scalaire (ρY^{e^-}) de la gauche vers la droite (et inversement si $S^{e^-} \kappa^{e^-} E < 0$). D'où l'idée d'utiliser une discrétisation décentrée qui fait intervenir les valeurs de (ρY^{e^-}) :

- aux nœuds amonts $(i - 1)$ et (i) , si $(S^{e^-} \kappa^{e^-} E > 0)$:

$$S^{e^-} \kappa^{e^-} E_x \frac{\partial \rho Y^{e^-}}{\partial x} = S^{e^-} \kappa^{e^-} E_x \frac{(\rho Y^{e^-})_i - (\rho Y^{e^-})_{i-1}}{\Delta}$$

- aux nœuds avals $(i + 1)$ et (i) , si $(S^{e^-} \kappa^{e^-} E < 0)$:

$$S^{e^-} \kappa^{e^-} E_x \frac{\partial \rho Y^{e^-}}{\partial x} = S^{e^-} \kappa^{e^-} E_x \frac{(\rho Y^{e^-})_{i+1} - (\rho Y^{e^-})_i}{\Delta}$$

Termes source chimiques : L'ensemble des réactions constituant le mécanisme réactionnel des espèces chargées (cf. tableau 5.2) est intégré dans le code de calcul. Les taux de réaction directs et inverses ainsi que les termes source des espèces chargées, $\dot{\omega}_k$, sont calculés à partir des lois et des données présentées dans les sections précédentes et dans l'annexe (A.1).

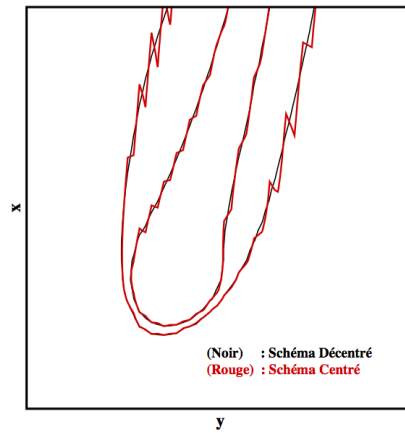
Une partie des réactions ioniques se produisent d'une manière très rapide et imposent un temps caractéristique très faible d'un facteur 10^{-3} fois plus petit que le pas de temps imposé par l'écoulement. La prise en compte de ces réactions alourdit significativement le temps de calcul et rend l'opération quasiment impossible. C'est pourquoi, une linéarisation des équations de transport des espèces chargées, comme détaillée par la suite, est proposée dans cette étude.

L'équation 5.4.14 est résolue en écrivant :

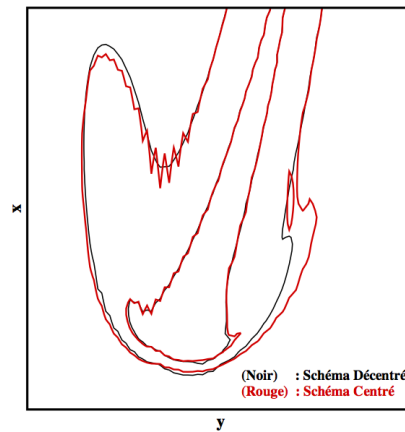
$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} = \left(-\nabla \cdot (\rho(\vec{V} + \vec{V}^{\mathcal{C}}) Y_k) + \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k - S_k \rho \kappa_k Y_k E) + \dot{\omega}_k \right)^{(t-\Delta t)} \quad (5.4.15)$$

Le taux global de production ou de consommation d'une espèce chargée calculé à un instant $t - \Delta t$ (éq.5.3.11 et éq.5.3.12), en utilisant une loi d'Arrhenius (éq.5.3.13), peut s'écrire sous la forme :

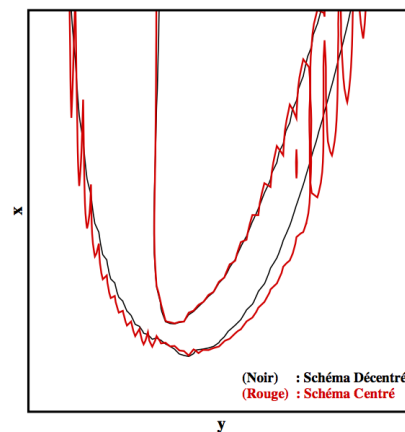
$$(\dot{\omega}_k)^{(t-\Delta t)} = a^{(t-\Delta t)} \cdot (\rho Y_k) + b_1^{(t-\Delta t)}, \text{ avec } a \leq 0 \quad (5.4.16)$$



-Electrons-



-Ions positifs-



-Ions négatifs-

Figure 5.4 – Isolignes des espèces chargées collectés après environ 2 (ms) de l'application de champ électrique. On voit des instabilités numériques dans le cas où la diffusion électrique des électrons est décrite avec un schéma centré qui n'apparaissent pas lorsqu'un schéma décentré est utilisé.

En mettant :

$$b^{(t-\Delta t)} = \left(-\nabla \cdot (\rho(\vec{V} + \vec{V}^C)Y_k) + \nabla \cdot (\rho D_k \nabla Y_k - S_k \rho \kappa_k Y_k E) \right)^{(t-\Delta t)} + b_1^{(t-\Delta t)}$$

L'équation (éq.5.4.15) devient :

$$(\rho Y_k)' = b + a \cdot (\rho Y_k) \quad (5.4.17)$$

Lorsque a et b ne sont pas nuls, en supposant a et b constants sur Δt , la solution de la dernière équation différentielle linéaire est l'ensemble des fonctions définies par :

$$(\rho Y_k)(t) = C e^{at} - \frac{b}{a}$$

où C est un réel se déterminant par la donnée des conditions initiales, par exemple, $(\rho Y_k)(t_0) = (\rho Y_k)_0$, ce qui donne alors :

$$(\rho Y_k)(t) = \left((\rho Y_k)_0 + \frac{b}{a} \right) e^{-at_0} e^{at} - \frac{b}{a}$$

Sur un pas de temps Δt , on aura :

$$(\rho Y_k)^t = (\rho Y_k)^{(t-\Delta t)} e^{a\Delta t} + \left(\frac{b}{a} \right)^{(t-\Delta t)} (e^{a\Delta t} - 1) \quad (5.4.18)$$

Lorsque a ou b est nul, la solution de l'équation (éq.5.4.17) s'obtient ainsi :

$$(\rho Y_k)^t = b\Delta t + (1 + a\Delta t)(\rho Y_k)^{(t-\Delta t)} \quad (5.4.19)$$

L'utilisation combinée des deux solutions (éq.5.4.18 et éq.5.4.19) dans le solveur a permis l'utilisation du pas de temps contrôlé par l'aérodynamique de l'écoulement, qui est pratiquement mille fois plus grand que le pas de temps imposé par la chimie des ions pour lequel le schéma explicite d'origine du code est stable. Les résultats obtenus avec le schéma précédent, sans et avec application de champ électrique, coïncident bien avec ceux réalisés avec le schéma explicite de solveur (voir figure 5.5). Toutefois, un gain en temps de calcul d'un facteur environ 1000 est obtenu avec la méthode de linéarisation développée ici.

Les fractions massiques des espèces chargées dans les flammes ont des valeurs assez faibles (de l'ordre de 10^{-9} pour les ions et 10^{-13} pour les électrons). En conséquence, pour avoir une meilleure précision lors des calculs numériques, ces fractions massiques multipliées par des coefficients d'agrandissement (10^{+9} pour les ions et 10^{+13} pour les électrons) sont transportées.

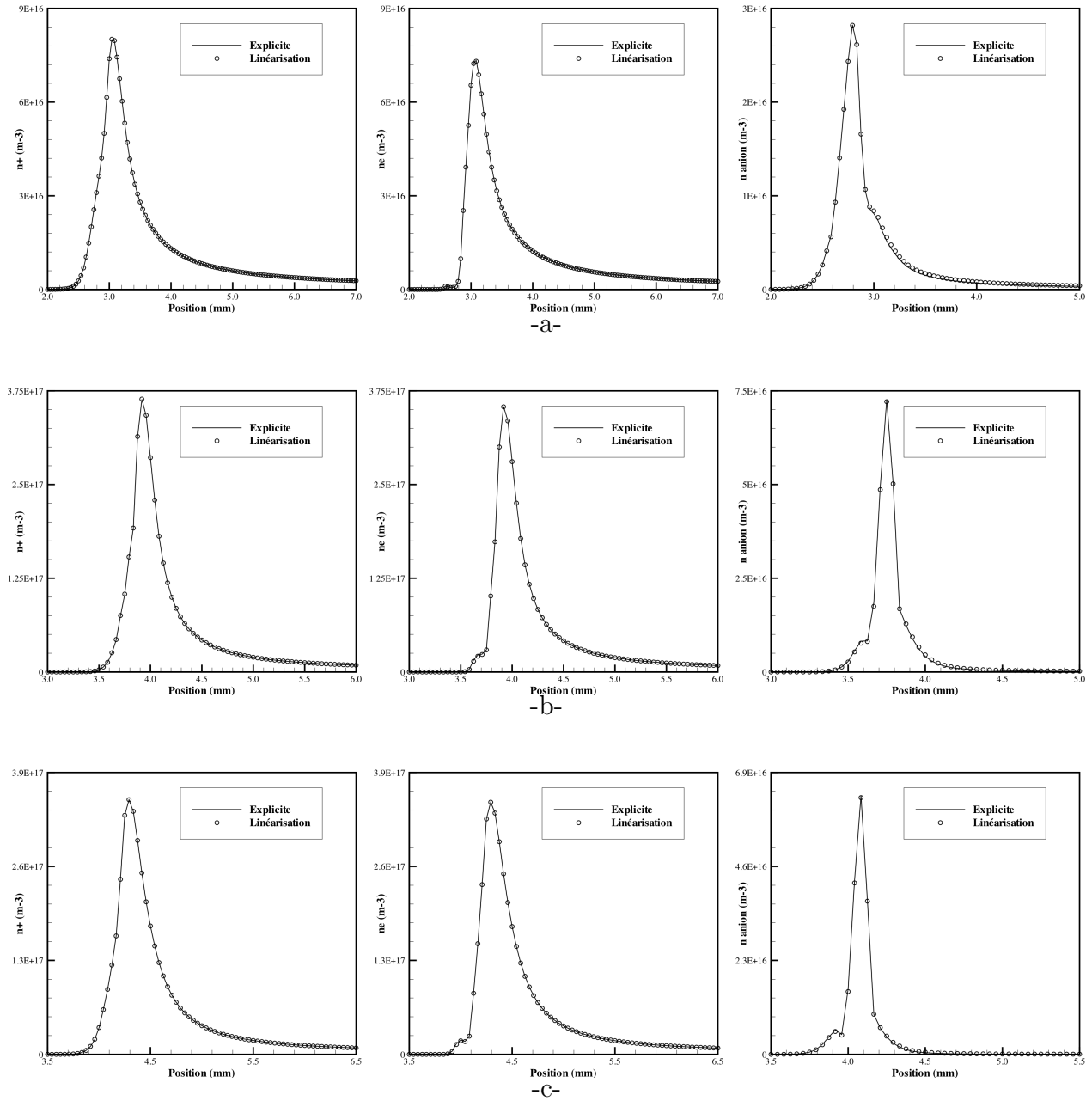


Figure 5.5 – Concentration totale des : (droite) ions positifs, (centre) électrons et (gauche) ions négatifs, dans une flamme méthane/air 1D prémélangée pour : (a) $\phi = 0,7$, (b) $\phi = 1,0$ et (c) $\phi = 1,2$. Comparaison entre le schéma explicite de code et celui développé pour améliorer le pas de temps imposé par la chimie des ions (linéarisation des équations de transport des espèces chargées).

Chapitre 6

Evaluation du modèle de la cinétique chimique

Sommaire

6.1	Description des expériences étudiées	112
6.1.1	Expériences de Goodings : Méthane/Oxygène	112
6.1.2	Expérience de Wortberg : Méthane/Air	112
6.2	Comparaison avec l'expérience	113
6.2.1	Flamme pauvre de prémélange ($\phi = 0,216$) Méthane/Oxygène	115
6.2.2	Flamme pauvre de prémélange ($\phi = 0,513$) Méthane/Air	117
6.3	Analyse de l'effet des anions	120
6.4	Conclusion	121

Les concentrations totales des charges ioniques positive et négative sont des propriétés de flamme très importantes pour l'étude de la combustion assistée par champ électrique. Il est donc essentiel que le modèle ionique puisse prédire correctement ces grandeurs. Dans cette optique, nous procédons, dans ce chapitre, à l'évaluation du modèle chimique développé dans la présente étude pour prédire numériquement la répartition des espèces chargées dans les flammes. Ce travail consiste à calculer des flammes de la littérature, dans lesquelles les mesures de concentrations d'espèces chargées existent, et comparer les résultats obtenus par notre modèle et les résultats expérimentaux.

Des simulations ne considérant que les ions positifs et les électrons, c'est-à-dire en ne modélisant que la partie du modèle s'intéressant aux ions positifs (cf. section 5.3.3.1) schématisée sur la figure (5.2), sont réalisées et comparées aux résultats des simulations tenant compte des ions négatifs. Les buts de ces calculs sont (1) : d'analyser la contribution des ions négatifs, souvent négligés dans la littérature, dans la structure ionique des flammes, et (2) : d'étudier l'effet de leur inclusion dans le modèle sur les concentrations des ions positifs et des électrons.

6.1 Description des expériences étudiées

Les compositions ioniques des flammes prémélangées de méthane/oxygène et de méthane/air étudiées, respectivement, par Goodings et al. [71, 72] et Wortberg [83] sont calculées et utilisées pour l'évaluation du mécanisme réactionnel des espèces chargées.

Les données expérimentales concernant la densité des ions dans les flammes sont plutôt rares. Ces deux flammes sont choisies, puisqu'elles offrent des profils très détaillés des concentrations des ions à travers le front de flamme, et aussi car elles sont toutes les deux simulées par Prager [76, 172] (cf. section 5.3.1). En conséquence, le modèle de la cinétique chimique utilisé peut être confronté, à la fois, aux estimations expérimentales et numériques.

6.1.1 Expériences de Goodings : Méthane/Oxygène

Dans ces expériences [71, 72], la répartition spatiale des ions positifs et négatifs lors de la combustion à pression atmosphérique d'un mélange pauvre ($\phi=0,216$) méthane/oxygène a été mesurée par spectrométrie de masse. Tous les ions positifs et négatifs de masse inférieure, respectivement, à 55 et 110 unités de masse atomique ont pu être détectés. Néanmoins, un inconvénient de ces mesures est le manque d'informations concernant la température locale et les profils des espèces neutres. Ceci est important, puisque cette flamme est conique et pourrait donc être différente de la flamme plane simulée dans ce travail. Également, les valeurs absolues locales de la concentration de chaque ion n'ont pas été données, mais seule la concentration totale maximale des ions positifs a été estimée. Par ailleurs, l'échantillonnage des ions par spectrométrie de masse peut conduire à des écarts par rapport aux concentrations réelles des espèces, en raison des réactions rapides survenant éventuellement dans la chambre à vide du spectromètre. Les électrons peuvent aussi diffuser vers le cône d'échantillonnage métallique, ce qui pourrait modifier la structure ionique interne de la flamme. Cependant, malgré ces désavantages, les travaux de Goodings restent, à notre connaissance, les expériences les plus précises offrant ainsi des mesures relativement de haute résolution sur 11 cations et 30 anions.

6.1.2 Expérience de Wortberg : Méthane/Air

Dans cette expérience, la répartition spatiale des ions positifs dans une flamme plane et pauvre ($\phi = 0,513$), brûlant un mélange méthane/air de température initiale de 402 K à la pression atmosphérique, a été examinée. L'avantage de cette étude est la disponibilité des valeurs absolues locales, à la fois, de la concentration totale des ions positifs mais aussi de la température. Ceci est important, puisqu'il permet d'évaluer la position spatiale du profil

ionique calculé par rapport à celle du profil mesuré. Toutefois, aucune mesure des espèces chargées négativement n'a été réalisée. La concentration totale des ions positifs a été mesurée par sonde de Langmuir¹. Cette technique consiste à insérer une électrode dans la flamme et à appliquer un certain potentiel électrique (la valeur n'est pas donnée). L'électrode utilisée peut alors émettre des électrons et donc influencer la composition et les propriétés ioniques de la flamme. D'un autre côté, l'analyse des courants ioniques mesurés par la sonde, pour déterminer la concentration ionique correspondante, est assez complexe et peut augmenter les chances d'avoir des résultats non précis.

6.2 Comparaison avec l'expérience

Dans cette section, les résultats de simulation numérique de deux flammes monodimensionnelles prémélangées, brûlant sous les mêmes conditions que les deux flammes décrites dans la section précédente, sont présentés et comparés aux données expérimentales.

Le modèle complet (voir figure 5.3) de la chimie des particules chargées, tenant compte des cations, des anions et des électrons, est utilisé dans les simulations. En l'absence d'un champ électrique externe, la neutralité électrique est imposée et seulement les ions positifs et négatifs sont transportés. La concentration des électrons est obtenue en écrivant :

$$n^e = n^+ - n^{anion}$$

L'espacement local de la grille de maillage est environ 0,01 (mm). Cette résolution est largement suffisante pour décrire correctement les profils de la variable d'avancement et des espèces neutres, participant dans le mécanisme réactionnel des espèces chargées, à travers la zone de réaction. Les figures 6.1 et 6.2 présentent les évolutions spatiales des fractions massiques des radicaux responsables de la chimi-ionisation (CH et O), de la température et du terme source des ions positifs à travers le front de flamme pour les deux flammes étudiées. Comme le montre ces deux figures (6.1 et 6.2), tous les profils sont suffisamment résolus (assez de points à travers le front de flamme).

D'une manière générale, on constate que la concentration du radical CH impacte directement l'évolution spatiale de la production ionique. En effet, le terme source des cations est négatif dans les zones de préchauffage et de gaz brûlés où la concentration du CH est assez faible ou nulle, cela signifie que le processus de recombinaison des électrons menant à la dissociation du

1. Une sonde de Langmuir est un instrument qui permet de mesurer la température et la densité électronique, ainsi que le potentiel électrique d'un plasma

Chapitre 6. Evaluation du modèle de la cinétique chimique

cation H_3O^+ est plus dominant que la chimi-ionisation dans ces régions. Par ailleurs, la largeur de la partie du profil du terme source des cations présentant des valeurs positives (production) est quasiment la même que celle du radical CH.

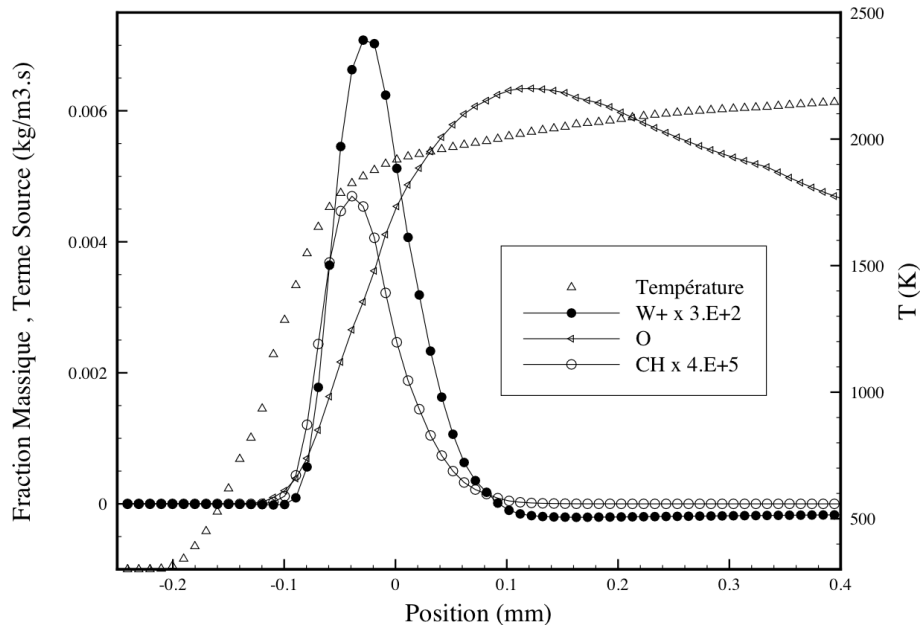


Figure 6.1 – Profils des fractions massiques des radicaux CH et O, du terme source des ions positifs et de la température dans les conditions de l'expérience de Goodings et al.[71, 72].

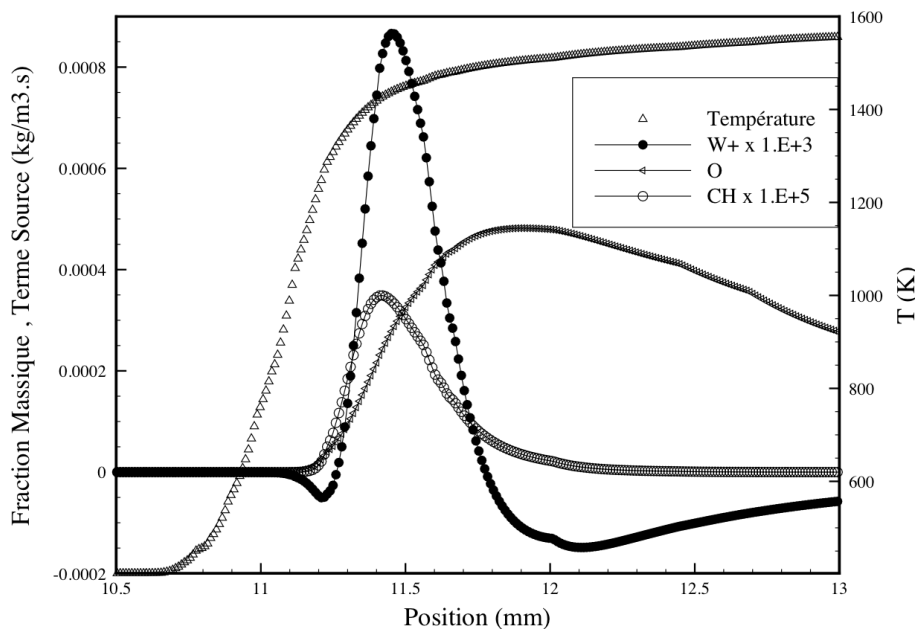


Figure 6.2 – Profils des fractions massiques des radicaux CH et O, du terme source des ions positifs et de la température dans les conditions de l'expérience de Wortberg [83].

6.2.1 Flamme pauvre de prémélange ($\phi = 0,216$) Méthane/Oxygène

Sur les figures 6.3 et 6.4, les résultats de simulation de la concentration totale, respectivement, des ions positifs et des ions négatifs sont comparés aux données expérimentales de Goodings et al. [71, 72], et aux résultats numériques de Prager et al. [76, 172]. En raison du manque de données expérimentales concernant les valeurs locales de température ou d'espèces neutres, le décalage de la position du profil ionique par rapport au profil mesuré ne peut être déterminé. Les profils de simulation sont donc déplacés pour faciliter la comparaison.

La forme générale du profil ainsi que la concentration maximale des ions positifs sont cohérentes avec l'expérience. Dans notre simulation, la valeur maximale correspond à $1,34 \times 10^{10}$ (cm^{-3}), ce qui signifie un écart relatif de moins de 1 % par rapport à la valeur expérimentale ($1,33 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$). D'un autre côté, la qualité de nos résultats est supérieure à celle de Prager et al. [76, 172] qui ont surestimé la concentration totale maximale de 30 % environ. Ceci est peut être dû à une meilleure prédiction des concentrations des radicaux neutres, participant dans les réactions ioniques tels que CH et O, par le mécanisme très détaillé GRI 3.0 [44] que celle obtenue avec un mécanisme moins détaillé comme celui utilisé par Prager et ses coauteurs.

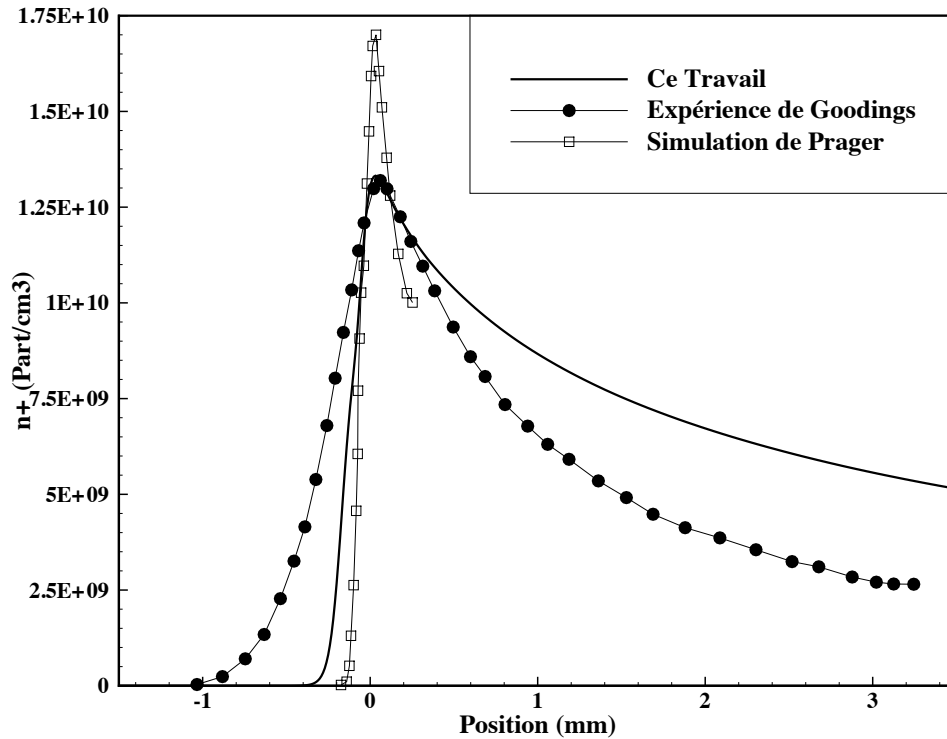


Figure 6.3 – Concentration des ions positifs (ligne) en comparaison avec l'expérience de Goodings et al. [72] (Symboles pleins) et la simulation de Prager et al. [76] (Symboles creux).

L'accord du profil des anions avec les données expérimentales n'est pas aussi bon que celui du profil des cations. Alors que la forme générale du profil est bien reproduite, la concentration des ions négatifs est sous-estimée en moyenne de 30% environ. Par exemple, la valeur maximale correspond à $6,32 \times 10^9$ (cm^{-3}), soit un écart relatif de 27% par rapport à la valeur expérimentale qui est de $8,7 \times 10^9$ (cm^{-3}). Par ailleurs, la forme générale et la largeur du profil de notre simulation coïncident bien avec celles de la simulation de Prager et al. [76, 172]. En revanche, ces derniers surestiment la concentration maximale des anions de 13% environ par rapport à la valeur expérimentale.

Les figures 6.3 et 6.4 montrent clairement que les profils expérimentaux sont plus étendus par rapport à ceux des résultats de simulation. Dans leurs articles [71, 72], Goodings et ses coauteurs affirment que les profils ioniques en amont de la zone de réaction seraient élargis en raison de problèmes expérimentaux, mais ils ne quantifient pas l'étendue de cet élargissement. Ceci peut donc expliquer la différence de largeur entre les profils expérimentaux et numériques. De l'autre côté, comme on pouvait le constater à partir des résultats de la concentration des ions chargés négativement (cf. figure 6.4), les valeurs de concentration des anions ont besoin d'être améliorées. Cela dépend principalement de la disponibilité de données cinétiques (mécanismes

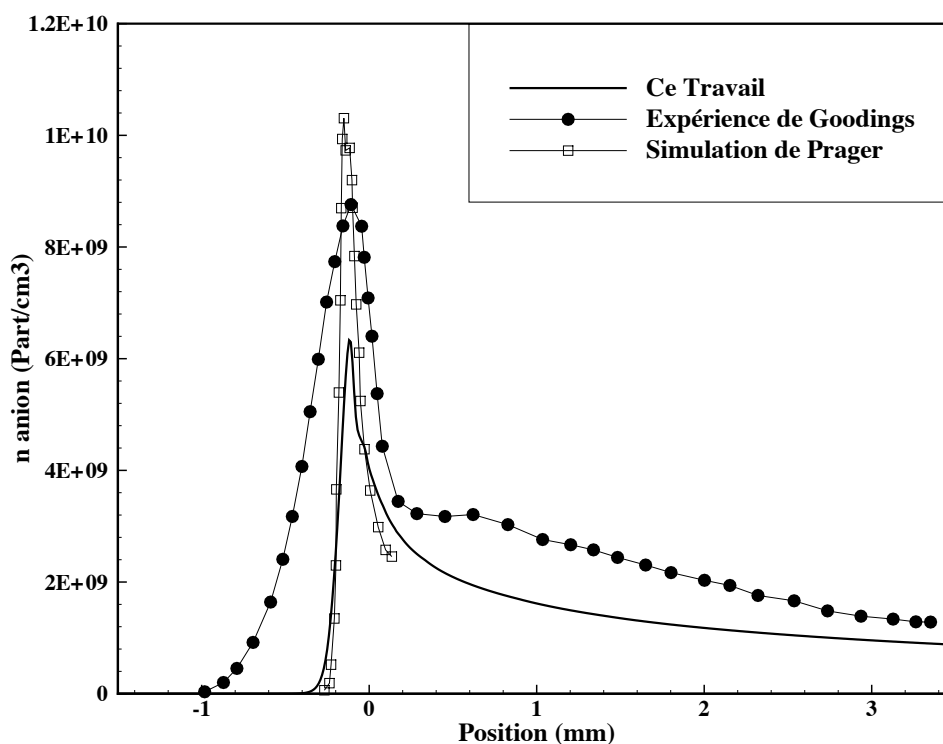


Figure 6.4 – Concentration des ions négatifs (ligne) en comparaison avec l'expérience de Goodings et al. [72] (Symboles pleins) et la simulation de Prager et al. [76] (Symboles creux).

réactionnels, taux de réaction, ...) et de transport (diffusion) supplémentaires, précises et plus complètes.

6.2.2 Flamme pauvre de prémélange ($\phi = 0,513$) Méthane/Air

Dans une seconde comparaison, les résultats de la simulation numérique concernant les concentrations totales ioniques sont confrontées aux mesures expérimentales de Wortberg [83] et aux calculs numériques de Prager [172].

La densité totale des ions positifs est comparée aux valeurs expérimentales et numériques sur la figure 6.5. Comme le montre cette figure, le présent modèle de cinétique chimique sous-estime la densité maximale des ions positifs de 50%. Toutefois, le processus de recombinaison dans les gaz brûlés est assez bien estimé. Prager et al. [172] ont obtenu une concentration ionique positive légèrement plus élevée que celle obtenue dans le présent travail, mais ils sous-estiment également la valeur expérimentale de 45%, quant à leur concentration ionique dans les gaz brûlés, elle est trop faible en comparaison avec l'expérience.

Le manque d'accord entre les simulations numériques et les mesures expérimentales peut être attribué, en grande partie, à la précision de la technique expérimentale utilisée. En effet, dans

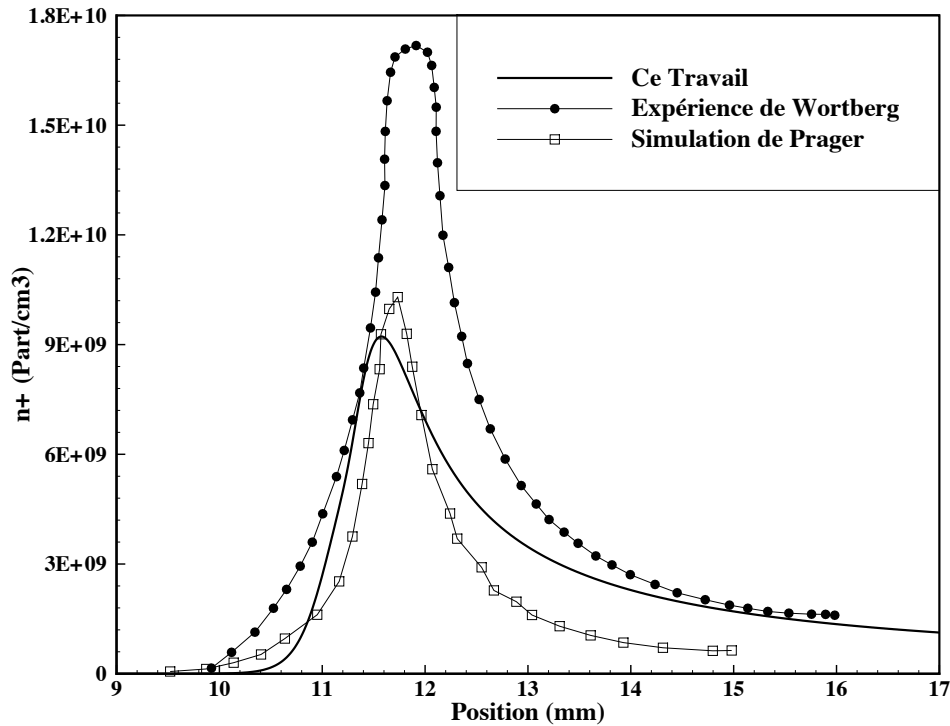


Figure 6.5 – Concentration des ions positifs (ligne) en comparaison avec l'expérience de Wortberg et al. [83] (Symboles pleins) et la simulation de Prager et al. [172] (Symboles creux).

cette méthode, la détermination de la concentration ionique est basée sur la mesure des valeurs locales du courant ionique et de température. L'auteur utilise une formule où la densité locale des ions positifs varie proportionnellement avec l'intensité du courant des cations et inversement proportionnellement avec la racine carrée de la température. Cela signifie que l'exactitude des profils ioniques dépend essentiellement de la précision des mesures de ces deux grandeurs (le courant ionique et la température). Cependant, la sonde (électrode) insérée dans la flamme émet des électrons ; en conséquence, un courant électronique s'ajoute aux courants ioniques internes appropriés à la flamme. Ceci peut alors expliquer les valeurs plus élevées des concentrations ioniques mesurées expérimentalement par rapport à celles calculées numériquement. D'un autre côté, la température adiabatique mesurée expérimentalement par l'interféromètre de Mach-Zehnder est de 1500 (K), soit un écart relatif de 6% environ par rapport à la valeur déterminée par notre modèle (1586 K) (figure 6.8). La dernière valeur (1586 K) correspond bien à la valeur calculée avec le logiciel CHEMKIN en utilisant le mécanisme GRI 3.0. Cette sous-estimation de la température peut alors également contribuer à la différence constatée entre les résultats de simulation et ceux de l'expérience.

Il convient de noter que la technique de mesure des courants ioniques utilisée par Goodings

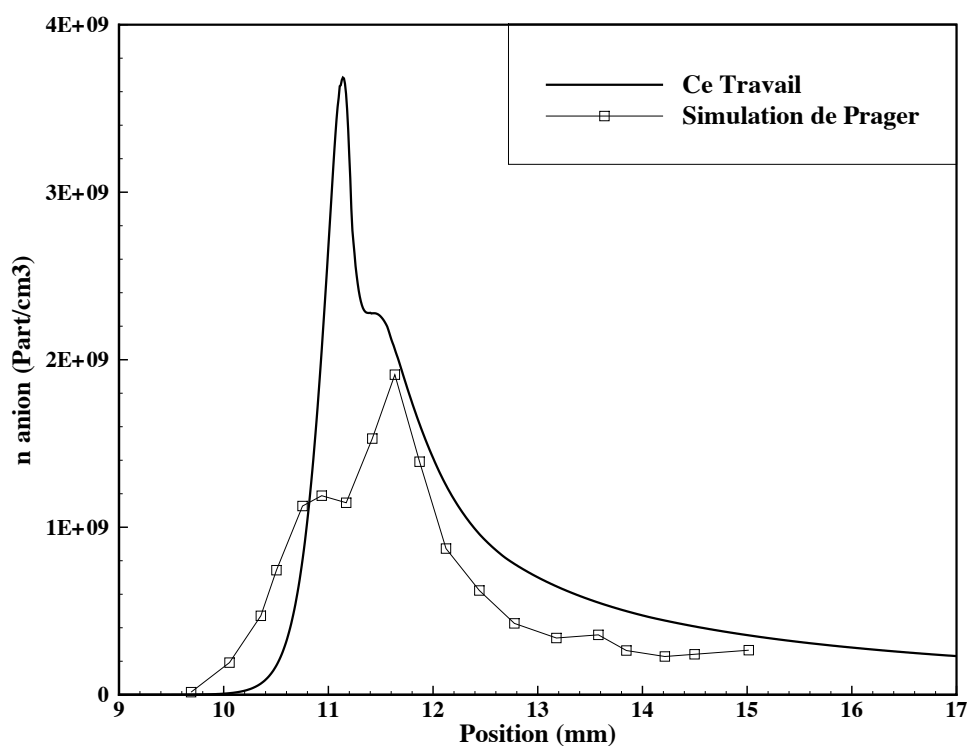


Figure 6.6 – Concentration des ions négatifs (ligne) en comparaison avec la simulation de Prager et al. [172] (ligne avec symboles).

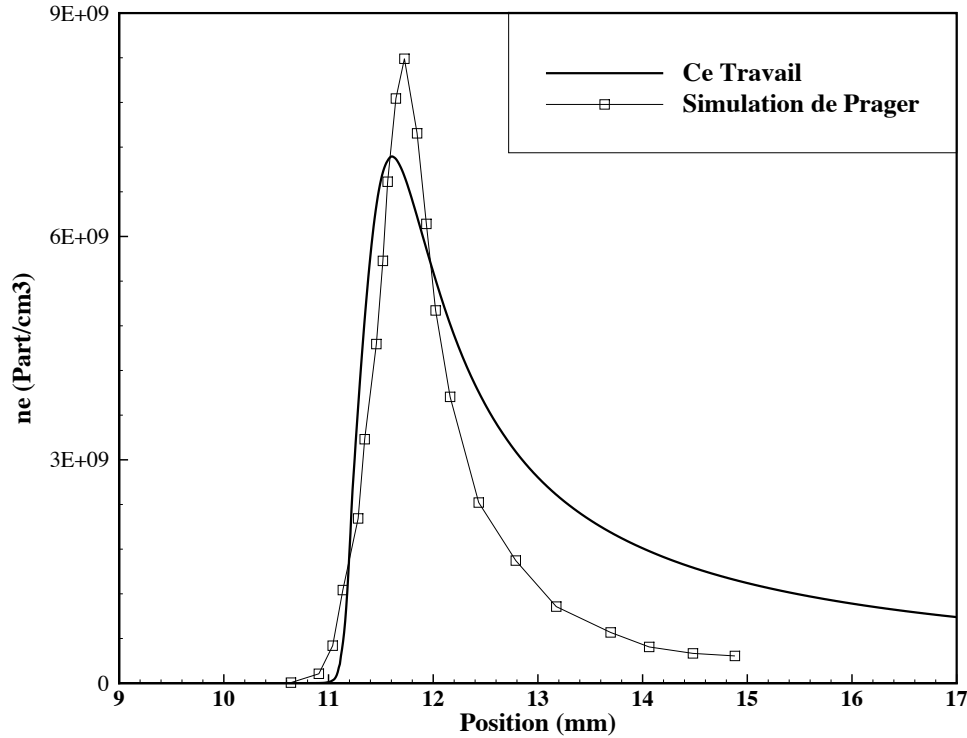


Figure 6.7 – Concentration des électrons (ligne) en comparaison avec la simulation de Prager et al. [172] (ligne avec symboles).

et al. [71, 72], à savoir la spectrométrie de masse, représente un niveau de précision plus élevé que la méthode de la sonde de Langmuir.

Les évolutions spatiales des ions négatifs et des électrons en comparaison avec les résultats numériques de Prager sont présentées, respectivement, sur les figures 6.6 et 6.7. Alors que la forme générale et la largeur des profils des espèces négatives sont similaires dans les deux simulations, les valeurs locales des densités des espèces chargées sont différentes, en particulier celles des anions (cf. figure 6.6). Néanmoins, à cause du manque de données expérimentales concernant les espèces chargées négativement, il n'a pas été possible de trancher sur quel mécanisme chimique est le plus précis.

Les profils spatiaux, expérimental et numérique, de la température sont présentés sur la figure 6.8. Comme dit précédemment, la simulation surestime la température par rapport à l'expérience. La répartition des ions positifs est tracée également sur cette même figure. Le but de cette juxtaposition est d'évaluer le positionnement du profil ionique par rapport au profil de température en comparaison avec les profils expérimentaux. Comme on peut le constater, la largeur de profil et la coordonnée spatiale de la concentration maximale obtenues, lors de la modélisation numérique, sont raisonnablement cohérentes avec celles de l'expérience. Le maxi-

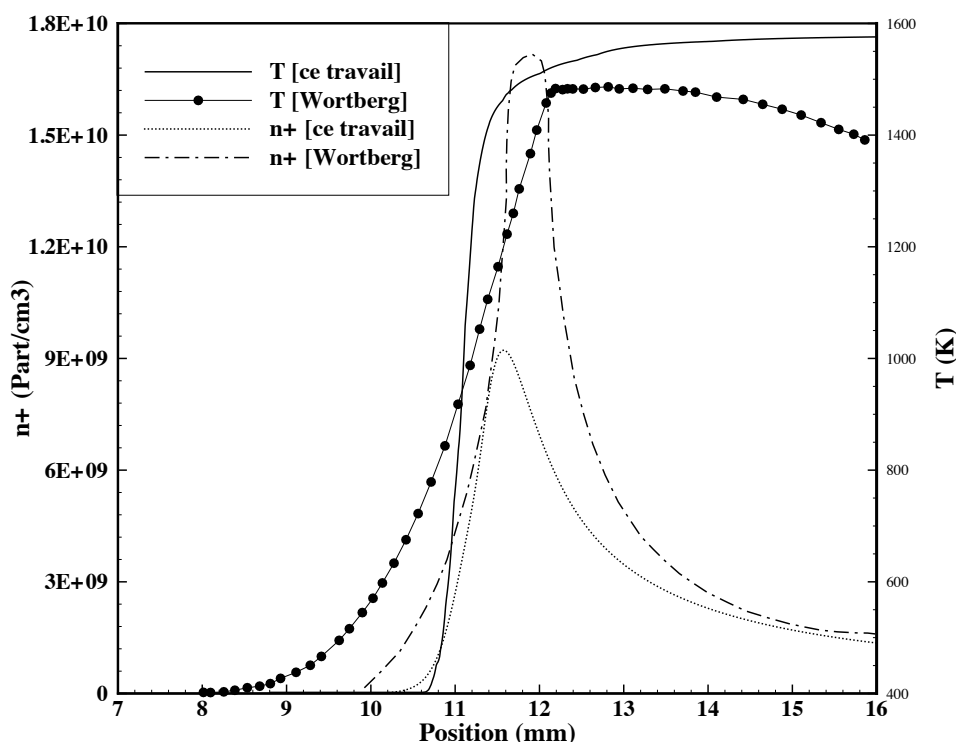


Figure 6.8 – Évolution spatiale de la température et de la concentration ionique positive en comparaison avec l'expérience de Wortberg [83].

Le maximum de la concentration ionique, numérique ou expérimental, est enregistré juste avant que la température adiabatique ne soit atteinte, dans la région où les concentrations des molécules neutres responsables de la chimi-ionisation (CH et O) sont au maximum. La concentration ionique diminue ensuite d'une manière significative dans la région des gaz brûlés.

6.3 Analyse de l'effet des anions

Les figures 6.9 et 6.10 comparent l'évolution spatiale des densités totales des ions positifs, sans et avec transport des anions, pour les deux flammes étudiées.

Cette comparaison a pour but d'analyser l'effet de l'inclusion des anions dans le modèle sur la concentration totale des cations. Nous remarquons que la densité ionique positive obtenue en prenant en compte les anions est inférieure à celle obtenue en négligeant leur transport, en particulier dans les zones où la recombinaison domine la chimie des ions positifs. Ceci peut être vérifié aisément en comparant les évolutions des densités ioniques avec celles des termes source des cations présentés sur les figures 6.1 et 6.2. En effet, lorsqu'on considère les anions dans le modèle, il y aura moins d'électrons participant dans les réactions de recombinaison, puisqu'une

partie de ces électrons intervient dans le processus de production et conversion des anions. En conséquence, la recombinaison des cations est moins importante et leur concentration est supérieure dans le cas où les anions sont transportés.

Les profils des anions sont également comparés à ceux des cations sur ces deux mêmes figures (6.9 et 6.10). Pour les deux flammes étudiées, la concentration totale des ions négatifs a des valeurs comparables à celles des ions positifs, notamment en amont de la zone de réaction. Cela signifie que les anions peuvent jouer un rôle primordial dans le cadre d'une étude de l'interaction d'un champ électrique avec la flamme. En aval de la zone de réaction, les anions se présentent avec des valeurs relativement assez faibles, et donc ce sont les électrons qui dominent la charge totale négative.

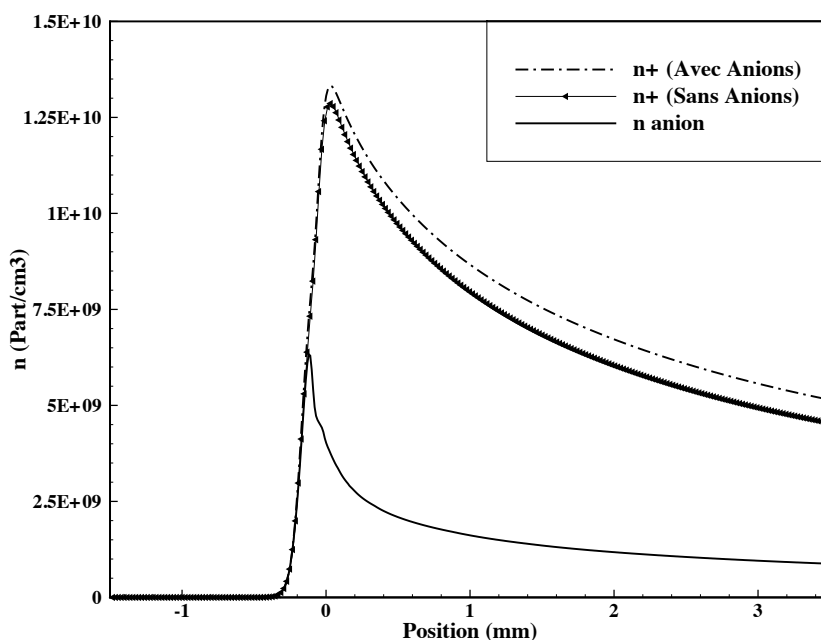


Figure 6.9 – Concentration des ions positifs (ligne) en prenant en compte les anions et (ligne avec symboles) en négligeant les anions, dans les conditions des expériences de Goodings et al. [71, 72].

6.4 Conclusion

Globalement, le mécanisme de cinétique chimique développé dans cette étude prédit avec succès la densité totale des ions positifs dans la flamme de prémélange pauvre méthane/oxygène étudiée par Goodings et al.[71, 72]. Cette étude présente, d'ailleurs, la base de données expérimentales la plus complète de la littérature sur la répartition des espèces chargées dans les flammes. Également, la simulation reproduit qualitativement l'évolution spatiale de la concen-

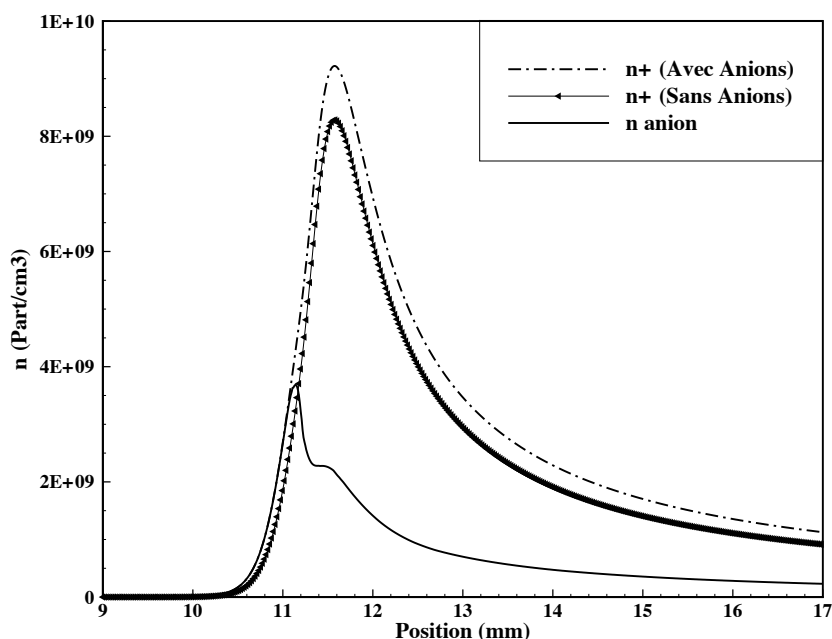


Figure 6.10 – Concentration des ions positifs (ligne) en prenant en compte les anions et (ligne avec symboles) en négligeant les anions, dans les conditions de l’expérience de Wortberg et al. [83].

tration totale des ions négatifs, mais présente des erreurs sur les valeurs locales. En ce qui concerne la flamme de prémélange pauvre méthane/air investiguée par Wortberg [83], un écart significatif entre les valeurs locales calculées et celles mesurées est observé. Néanmoins, la largeur et la coordonnée spatiale du profil de la concentration ionique sont cohérentes avec l’expérience. En vue du manque des mécanismes définitifs sur la formation des ions dans les flammes, ainsi que le faible niveau de précision concernant les données cinétiques disponibles (des incertitudes allant parfois jusqu’à 100%) et la rareté des études expérimentales sur la thématique, les résultats obtenus sont raisonnablement satisfaisants.

La qualité des résultats obtenue par notre modèle est, d’une manière générale, meilleure que celle des résultats de la simulation de Prager [76, 172]. L’utilisation d’une chimie tabulée, qui fournit avec précision les concentrations des espèces neutres participant dans le mécanisme réactionnel des espèces chargées, semble alors une approche raisonnable.

La qualité prédictive de l’approche développée dans cette thèse, pour prendre en compte les espèces chargées, est un facteur déterminant pour pouvoir reproduire, au moins qualitativement, les observations expérimentales concernant l’effet de la polarité du champ électrique sur la stabilité des flammes. D’un autre côté, il faut retenir que la contribution des anions dans les compositions ioniques des flammes est loin d’être négligeable, et donc qu’il est important de les inclure dans un modèle décrivant l’interaction du champ électrique avec la flamme.

Chapitre 7

Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

Sommaire

7.1	Description de la configuration étudiée	124
7.2	Comportement de la flamme en présence du champ électrique	129
7.2.1	Impact du champ électrique sur une flamme suspendue et stabilisée naturellement	129
7.2.2	Impact du champ électrique sur une flamme qui est soufflée	139
7.2.3	Apparition des instabilités	140
7.3	Répartition des espèces chargées	143
7.4	Répartition du champ électrique	153
7.5	Influence de la fréquence	164
7.6	Influence de la polarité	166
7.7	Dynamique de l'écoulement à la base de la flamme	168
7.8	Effet des anions	173
7.9	Effet du choix de la mobilité électrique	178

Dans le but d'examiner l'effet du vent ionique sur la stabilisation des flammes, le modèle mathématique simplifié, développé dans cette étude, a été testé sur une flamme laminaire, décrochée et soumise à un champ électrique. La configuration électrique modélisée est inspirée de celle du dispositif expérimental du CORIA [115] (cf. section 4.3.2.2 page 78); l'objectif est de reproduire qualitativement leurs observations. L'avantage de cette étude expérimentale [115] est la disponibilité d'une analyse paramétrique de la stabilisation de flammes-jets par haute-tension, à la fois, continue (positive et négative) mais aussi alternative. Cette analyse avait pour but principal de déterminer les propriétés du champ électrique optimales pour l'amélioration de la stabilisation.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

Ce chapitre présente donc les résultats de simulation de l'application d'une tension électrique continue positive, continue négative et alternative à une flamme de diffusion suspendue. La sensibilité de la hauteur de stabilisation de la flamme à la tension électrique appliquée a été étudiée, et la modification du champ dynamique en amont de la base de flamme induite par le champ électrique externe a été mise en évidence. Une interprétation des mécanismes permettant la stabilisation par des tensions continues ou alternatives sera alors proposée.

7.1 Description de la configuration étudiée

Pour analyser l'effet du champ électrique sur la stabilisation d'une flamme de diffusion laminaire, un cas test générique, dans lequel l'intensité du voltage appliqué et la vitesse de l'écoulement coaxial peuvent être variées facilement, a été conçu. Cette configuration est schématisée sur la figure 7.1. Elle emploie un système de coordonnées bidimensionnel.

Conditions dynamiques : Dans la configuration étudiée, le jet central du méthane de diamètre 2 (mm) et de vitesse 6 (m/s) est entouré d'un jet d'air d'une vitesse allant de 0,8 à 2 (m/s). Une lèvre d'injecteur d'une épaisseur de 0,5 (mm) est également considérée dans les simulations. Cette lèvre est connue pour avoir un fort impact sur les caractéristiques de stabilisation des flammes.

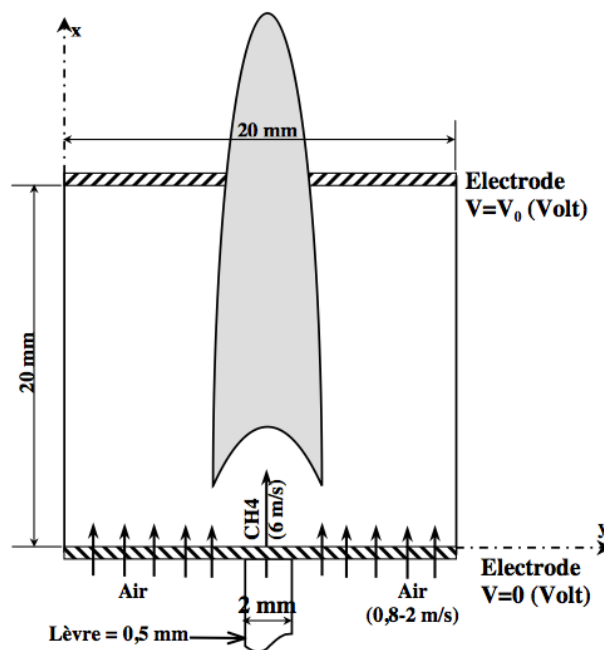


Figure 7.1 – Configuration étudiée.

7.1 Description de la configuration étudiée

Dans un premier temps, l'analyse de l'effet du champ électrique sur la stabilisation de la flamme est réalisée en fixant la vitesse d'air à une valeur de 0,8 (m/s). Tout d'abord, la flamme est calculée sans l'application du champ électrique. La flamme se stabilise naturellement à une hauteur d'accrochage (voir figure 7.7) égale à environ 3,5 fois le diamètre de l'injecteur du carburant. Cette hauteur de flamme, sans champ électrique extérieur et avec une vitesse d'air égale à 0,8 (m/s), est prise comme la position de référence. Ensuite, une fois que la flamme est située à sa hauteur de référence, des potentiels électriques de valeurs progressives et de différentes polarités sont appliqués.

La capacité du champ électrique à empêcher le soufflage de la flamme a également été étudiée. La vitesse de l'air est alors augmentée de la valeur de référence de 0,8 (m/s) jusqu'à la valeur de 2 (m/s) par des pas de 0,25 (m/s). Les valeurs de vitesse d'air au-dessus de 1 (m/s) ne permettent pas, au moins dans le domaine de calcul, la stabilisation naturelle de la flamme. Sans champ électrique, la base de flamme se déplace donc vers le plan de sortie et la flamme est soufflée. Un potentiel électrique est alors appliqué quand la base de flamme atteint une hauteur donnée, et la valeur minimale stoppant la procédure de soufflage est enregistrée (voir section 7.2.2).

Configuration électrique : Le champ électrique est appliqué entre deux électrodes placées horizontalement et représentées par des grilles à mailles fines ne perturbant pas la dynamique de l'écoulement. L'une de ces deux électrodes est positionnée au niveau de l'injecteur (plan d'entrée des gaz), tandis que l'autre électrode est située dans la flamme à la sortie du domaine de calcul, qui est de dimension (20 mm × 20 mm). Le voltage électrique de valeur V_0 est appliqué directement à l'électrode placée dans la flamme. L'électrode inférieure est donc maintenue à tension nulle.

Selon la valeur du voltage appliqué, V_0 , la polarité de la configuration électrique peut être positive ($V_0 > 0$), négative ($V_0 < 0$) ou encore alternative ($V_0 > 0$ sur une demi-période et $V_0 < 0$ sur l'autre demi-période).

Comme dans les études expérimentales de la présente thématique, les tensions alternatives appliquées dans ce travail sont sinusoïdales (voir la figure 7.2) ; elles prennent la forme suivante :

$$V_0(t) = V_0 \times \text{Sin} \left(2\pi ft + \frac{\pi}{2} \right) \quad (7.1.1)$$

ici f (Hertz) représente la fréquence de la tension électrique.

Le positionnement des électrodes, retenu pour le cas-test, est pratiquement similaire à celui de la configuration expérimentale des travaux de thèse de Criner [115]. Dans cette expérience,

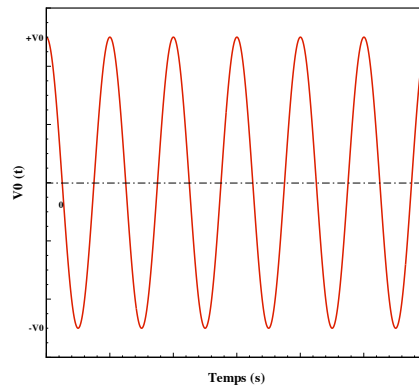


Figure 7.2 – Tension alternative appliquée : Signal sinusoïdal.

une seule électrode est utilisée. Elle a été placée dans la flamme et a été mise à la tension V_0 . L'environnement et le brûleur en céramique isolé électriquement ont joué le rôle de l'électrode de masse, qui est représentée par l'électrode de tension nulle dans notre configuration (électrode inférieure).

Conditions aux limites des espèces chargées : La résolution des équations de transport des espèces chargées (éq.5.1.5) nécessite de spécifier des conditions aux limites sur ces espèces.

Selon les principes de l'électricité, les cations (espèces chargées positivement) se déplacent toujours vers la cathode (d'où le nom cathode). De l'autre côté, les électrons et les anions (espèces chargées négativement) s'éloignent de la cathode en se déplaçant toujours vers l'anode (d'où le nom anode). Au vu de ces déplacements, on peut conclure que les conditions aux limites des espèces chargées aux frontières inférieure et supérieure du domaine de calcul dépendent de la nature de l'électrode (anode ou cathode). Par ailleurs, la polarité de la cathode ou de l'anode dépend du type de dispositif et peut même varier selon le mode de fonctionnement. Dans un dispositif qui consomme de l'énergie électrique, comme le nôtre, l'anode constitue la borne positive et la cathode représente la borne négative.

Au plan d'entrée (électrode inférieure, $x=0$), en prenant en considération les déplacements des espèces chargées, des densités d'électrons et d'ion négatifs nulles et des gradients de densité d'ions positifs nuls sur l'électrode pendant la phase cathodique sont considérés. À l'opposé, des gradients de densité d'électrons et d'ions négatifs nuls et des densités nulles d'ions positifs sont spécifiés pendant la phase anodique.

L'électrode supérieure située au plan de sortie ($x= 20$ mm) est placée dans la flamme qui produit continuellement les espèces chargées. De ce fait, la fraction massique de n'importe quelle espèce, chargée positivement ou négativement, ne peut être nulle à l'électrode supérieure. Des

7.1 Description de la configuration étudiée

gradients nuls de fractions massiques de toutes les espèces chargées sont alors considérés à l'électrode supérieure quelque soit sa nature (cathode ou anode).

La figure 7.3 montre les conditions aux limites retenues dans les simulations pour les différentes situations de polarité électrique possibles (continue positive, continue négative et alternative). Dans le cas particulier de polarité alternative, le rôle de l'électrode inférieure change de manière périodique. Elle est tantôt la cathode tantôt l'anode, selon que la tension appliquée à l'électrode supérieure est, respectivement, positive ou négative. Pour cette raison, une variation cyclique des conditions au plan inférieur sur les espèces chargées est imposée (cf. figure 7.3).

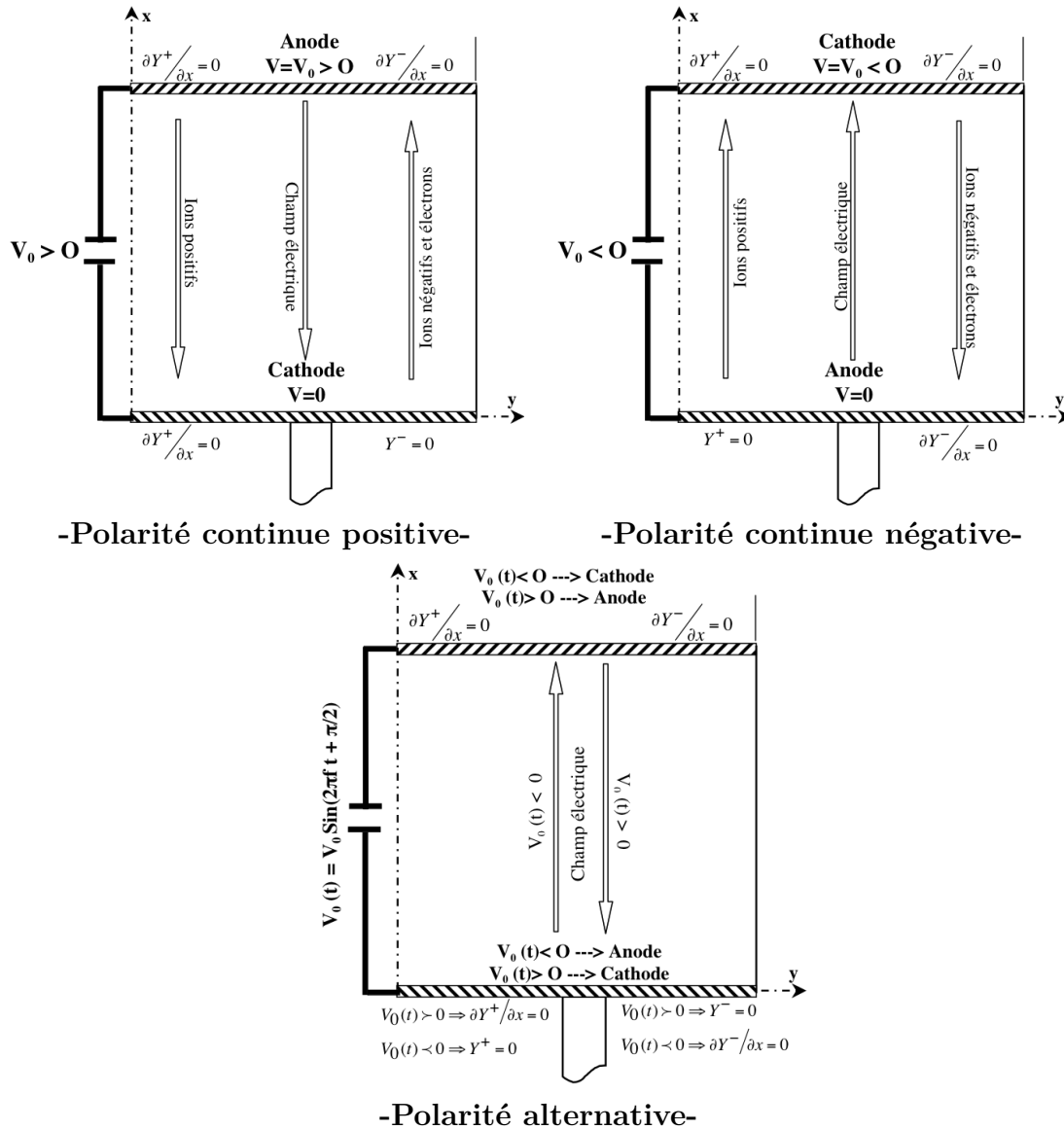


Figure 7.3 – Conditions aux limites des espèces chargées.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

Les conditions aux limites des espèces chargées sur les électrodes sont simplifiées, puisqu'elles ne prennent pas en compte l'existence de la gaine au voisinage des électrodes. Le but ici n'est pas de reproduire à l'identique la polarisation de la flamme après l'application de la tension, mais de proposer un moyen simple pour polariser la flamme afin d'examiner le comportement des espèces chargées dans et en amont de la zone de réaction.

Choix du maillage : La taille du maillage et sa distribution spatiale ont un impact crucial sur l'exactitude des résultats de calcul. En raison des gradients importants de la vitesse près de l'entrée des gaz (injection), un maillage non-uniforme très dense au voisinage de ces endroits est choisi. La figure 7.4 montre la grille de maillage utilisée.

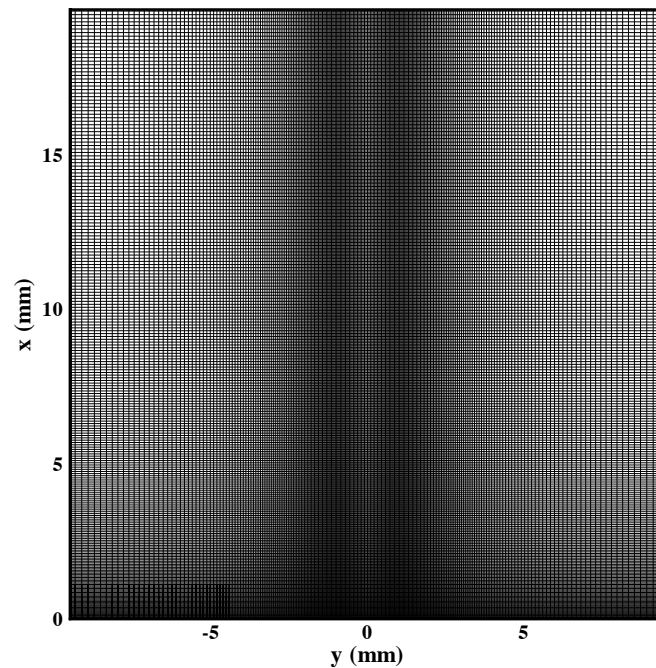


Figure 7.4 – Grille de maillage utilisée.

La dépendance de la solution par rapport à la taille des mailles a été testée en considérant une valeur du potentiel électrique de polarité continue positive égale à 0,5 (kV) appliquée à la flamme de référence ($V_{air} = 0,8$ m/s). Deux maillages de tailles différentes, respectivement, 256×256 et 512×512 ont été considérées. Les résultats obtenus ont montré que la résolution du maillage n'a aucun impact sur la hauteur d'accrochage, qui présente un paramètre important pour caractériser la stabilisation de flamme.

Pour extraire des informations sur le champ de vitesse en amont de la base de flamme, il est préférable d'utiliser une résolution élevée. Les profils des vitesses axiale, u , et radiale, v ,

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

extraits à la base de la flamme calculée avec les conditions de référence (sans champ électrique et $V_{air}=0,8$ m/s), sont montrés sur la figure 7.5 pour les deux grilles de maillage : 256×256 et 512×512 . Cette figure montre clairement que les profils des vitesses obtenus avec une grille de 256×256 sont suffisamment résolus. De plus, aucune différence notable de ces profils par rapport à ceux réalisés avec un maillage de 512×512 n'a été constatée. En conséquence, nous avons opté finalement pour une grille de 256×256 . Cette grille est caractérisée par des espacements locaux de $\delta_x = 0,055$ (mm) et $\delta_y = 0,046$ (mm) au voisinage de la base de la flamme de référence.

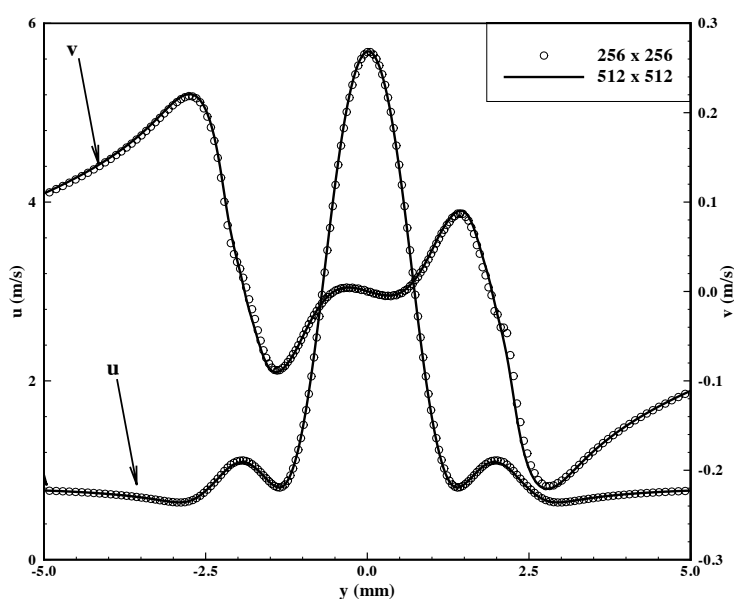


Figure 7.5 – Profils des vitesses axiale, u , et radiale, v , extraits à la base de flamme ($x =$ coordonnée axiale de la valeur maximale du terme source de dégagement de chaleur), obtenus avec les grilles de maillage : (symboles) 256×256 et (ligne) 512×512 .

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

7.2.1 Impact du champ électrique sur une flamme suspendue et stabilisée naturellement

Comme dit précédemment, l'analyse de l'effet du champ électrique sur la flamme stabilisée naturellement est réalisée avec des vitesses du méthane et d'air fixées, respectivement, à $V_{CH_4} = 6$ (m/s) et $V_{air} = 0,8$ (m/s). Seules la valeur et la polarité du potentiel électrique appliqué sont donc variées.

7.2.1.1 Impact du champ électrique sur la forme globale de la flamme

Une comparaison entre les iso-lignes de la variable d'avancement, avant et après l'application du champ électrique, est présentée sur la figure 7.6. Le côté gauche des figures expose les profils sans champ électrique et le côté droit présente les profils lorsque la flamme est soumise à un potentiel électrique de tension continue positive, continue négative ou alternative.

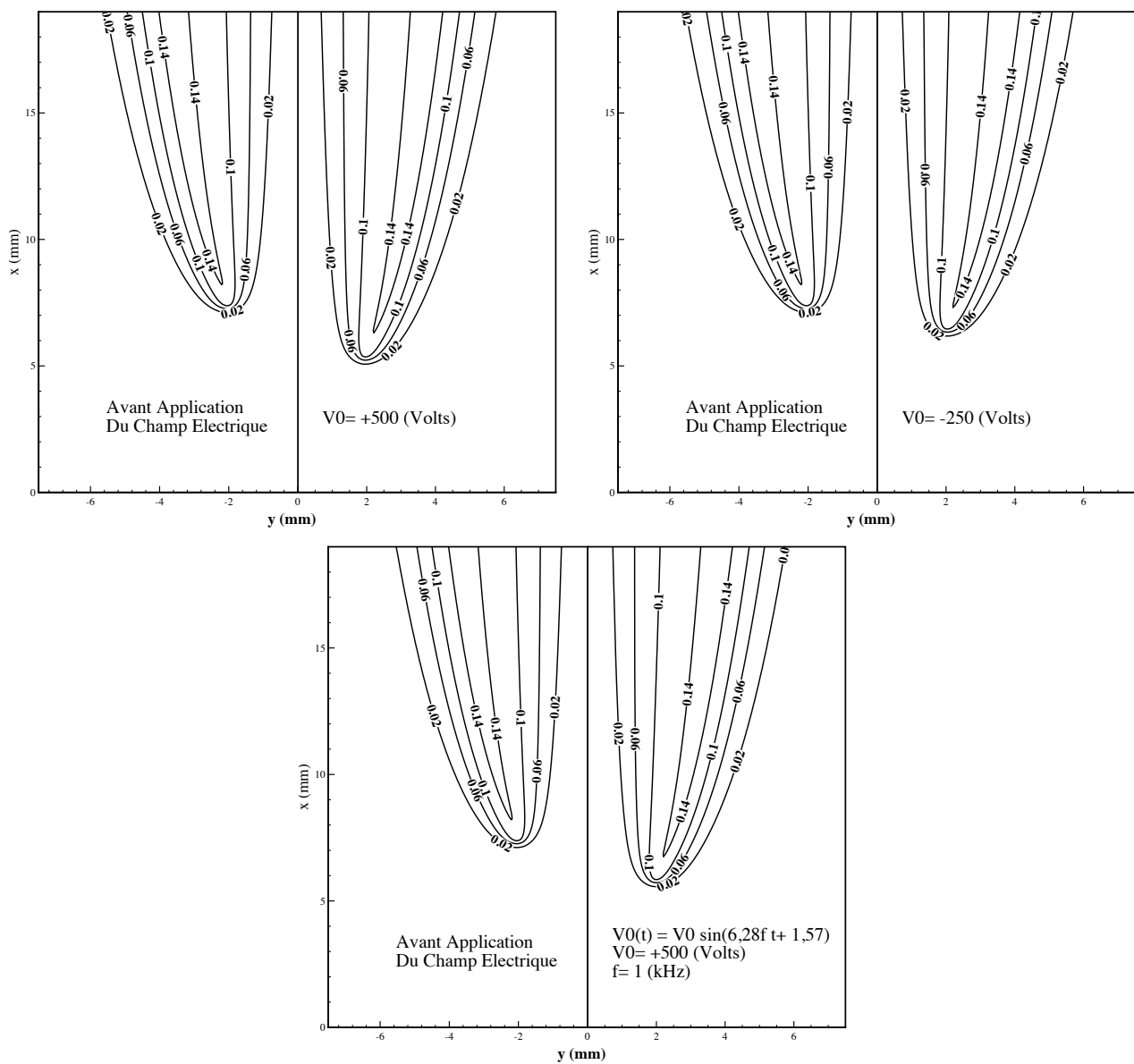


Figure 7.6 – Iso-lignes de la variable d'avancement, Y_c , AVANT (gauche) et APRÈS (droite) l'application du champ électrique, pour différentes polarités électriques.

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

Comme montré dans ces figures, quelque soit le type de la polarité appliquée, le comportement de la flamme est influencé par la présence du champ électrique : une diminution de la hauteur de stabilisation est notée. Par exemple, pour une tension de 0,5 (kV) en polarité continue positive, la base de flamme se situe à une hauteur inférieure de ce qu'elle était, sans une tension appliquée, de 25% environ. En outre, la flamme semble être translatée par l'application du champ électrique vers l'injecteur sans que sa forme globale soit changée.

Puisque les effets chimiques des espèces chargées sur les espèces neutres ne sont pas considérés dans le présent modèle, seul l'effet purement aérodynamique du vent ionique peut être responsable du comportement observé de la flamme.

7.2.1.2 Évolution des caractéristiques de stabilisation avec la tension appliquée

Hauteur de suspension : Elle est définie comme la coordonnée axiale de la base de flamme, où la variable d'avancement et la fraction de mélange sont égales, respectivement, à $Y_c = 5 \times 10^{-3}$ et $Z = Z_{st} = 0,055$. Une schématisation de la méthode de détermination de la hauteur et de la position radiale de la base de flamme est présentée sur la figure 7.7.

La variation de la hauteur de suspension de la flamme en fonction du voltage appliqué, pour les trois types de polarité, est montrée sur la figure 7.8. Après une certaine valeur limite

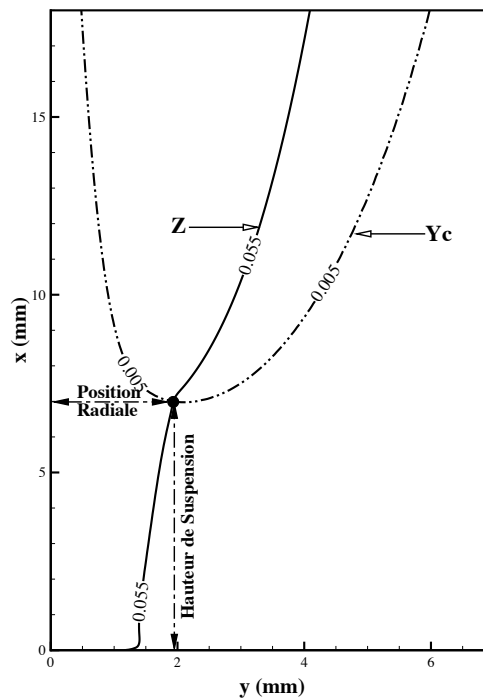


Figure 7.7 – Schéma définissant la hauteur de suspension et la position radiale de la base de flamme.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

du potentiel électrique, qui dépend du type de la polarité utilisée (~ 100 V pour une polarité continue positive par exemple), une diminution de la hauteur d'accrochage de la flamme avec l'augmentation de la tension appliquée est observée. En effet, lorsque la tension est inférieure à cette valeur minimale, la modification apportée à l'équation de mouvement des gaz par le champ électrique n'est pas suffisante pour changer de façon significative la vitesse de l'écoulement. En revanche, quand la tension est supérieure à cette valeur, la force électrique induite par le champ devient suffisante pour modifier la dynamique de l'écoulement. La hauteur de suspension commence alors à diminuer, tout d'abord légèrement, puis comme la tension appliquée est encore accrue, la diminution de la hauteur de stabilisation est de plus en plus prononcée. D'autre part, lorsque le potentiel est plus grand qu'une certaine valeur limite maximale, qui dépend également du type de la polarité appliquée (~ 450 V pour une polarité continue négative par exemple), la flamme se place sur le sillage créé par la lèvre du brûleur. En conséquence, l'augmentation supplémentaire du potentiel, en dessus de cette valeur, n'a pratiquement plus d'effet sur la hauteur de stabilisation; néanmoins, des instabilités du front de flamme, dont l'amplitude dépend de la tension appliquée, peuvent apparaître (voir section 7.2.3).

Pour les valeurs de tension électrique variant entre les deux valeurs limites : maximale et minimale, on peut observer, pour les trois types de polarité, une évolution quasi-parabolique de la hauteur de stabilisation en fonction du potentiel appliqué; donc, la diminution de la hauteur de stabilisation est approximativement proportionnelle au carré du voltage employé.

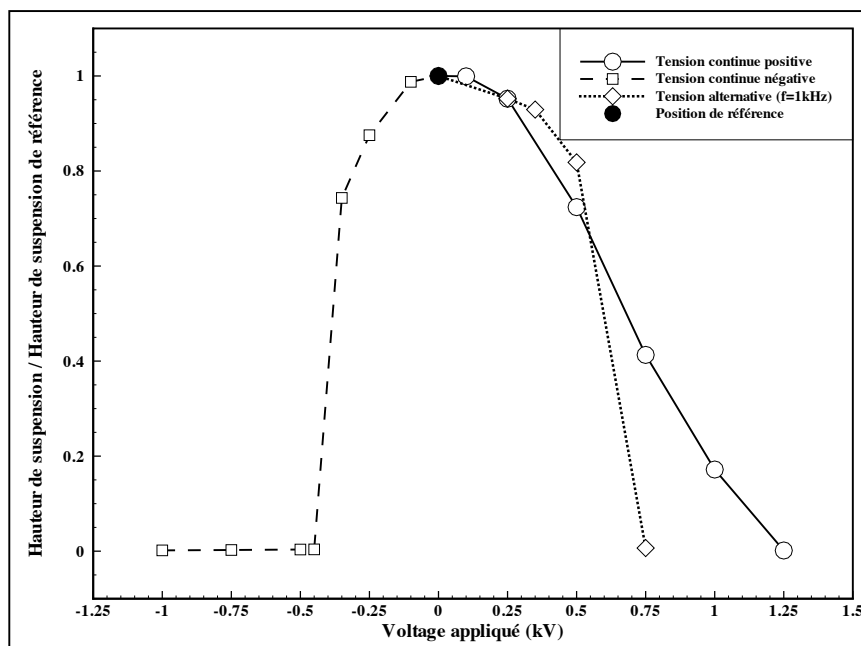


Figure 7.8 – Évolution de la hauteur de suspension de flamme en fonction du voltage appliqué.

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

Cependant, le coefficient de cette proportionnalité dépend du type de la polarité électrique, par exemple il est plus important dans le cas de polarité continue négative (Analyse proposée dans la section 7.6).

Ces résultats présentent une tendance commune avec ceux de Criner [115]. En effet, l'augmentation de la tension électrique appliquée augmente la force électrique (cf. figure 7.32) qui contrôle la quantité de mouvement transférée par les ions aux espèces neutres. Cette force ralentit le flux de l'écoulement principal des gaz frais; donc, son intensification permet à la flamme de se propager, de plus en plus, vers l'injecteur.

Dans toutes les simulations, quelque soit le potentiel et la polarité imposés, la flamme revient à sa position initiale une fois le champ électrique arrêté. Cela signifie qu'un équilibre entre les forces électriques induites par le champ et la quantité de mouvement de l'écoulement venant de l'injecteur est atteint à la nouvelle position où la flamme est stabilisée, et que cet équilibre est rompu quand le potentiel est coupé.

Position Radiale : La figure 7.9 montre l'évolution de la position radiale de la base de flamme (définie comme montré sur la figure 7.7) avec la tension appliquée. Pareillement à la hauteur de stabilisation, la position radiale est, tout d'abord, légèrement modifiée par le potentiel appliqué. Ensuite, comme le potentiel est encore augmenté, la position radiale diminue ramenant ainsi la pointe de flamme, de plus en plus, près de l'axe du brûleur.

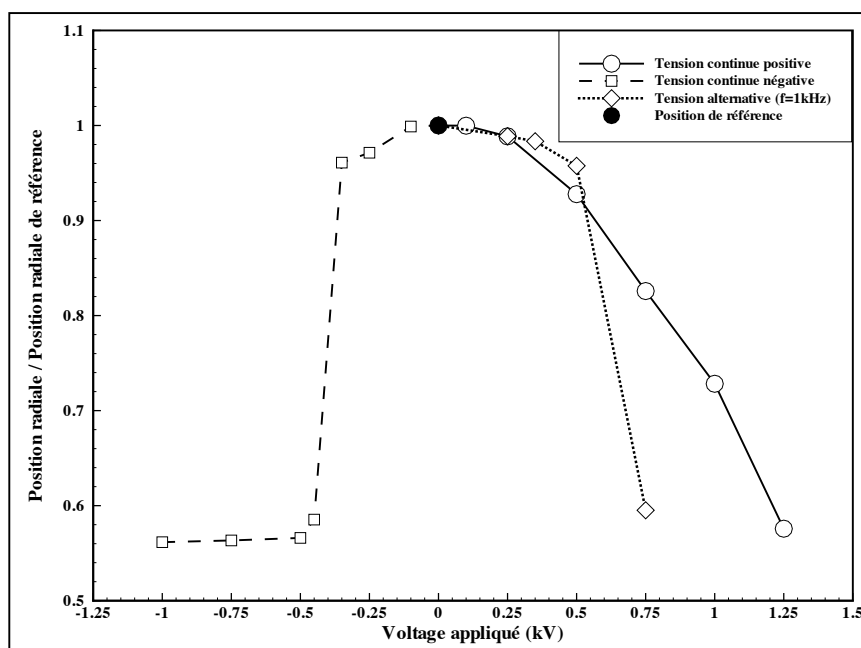


Figure 7.9 – Évolution de la position radiale de la base de flamme en fonction du voltage appliqué.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

Un gros plan du terme source d'énergie chimique (chaleur dégagée par la combustion) à la base de flamme, pour différents potentiels en polarité positive, est présenté sur la figure 7.10. On constate que la base de flamme, en se rapprochant du brûleur avec l'augmentation du potentiel électrique, se stabilise toujours le long de la ligne stœchiométrique. Comme cette ligne se rapproche de l'axe de brûleur quand on descend vers l'injecteur, il est donc logique d'observer une diminution de la position radiale de la pointe de flamme avec la diminution de la hauteur d'accrochage. D'un autre côté, l'orientation de la pointe de flamme est également modifiée lorsque la flamme se propage vers l'injecteur ; elle est de plus en plus inclinée vers l'axe central (région riche en carburant), à cause de l'augmentation des gradients de mélange.

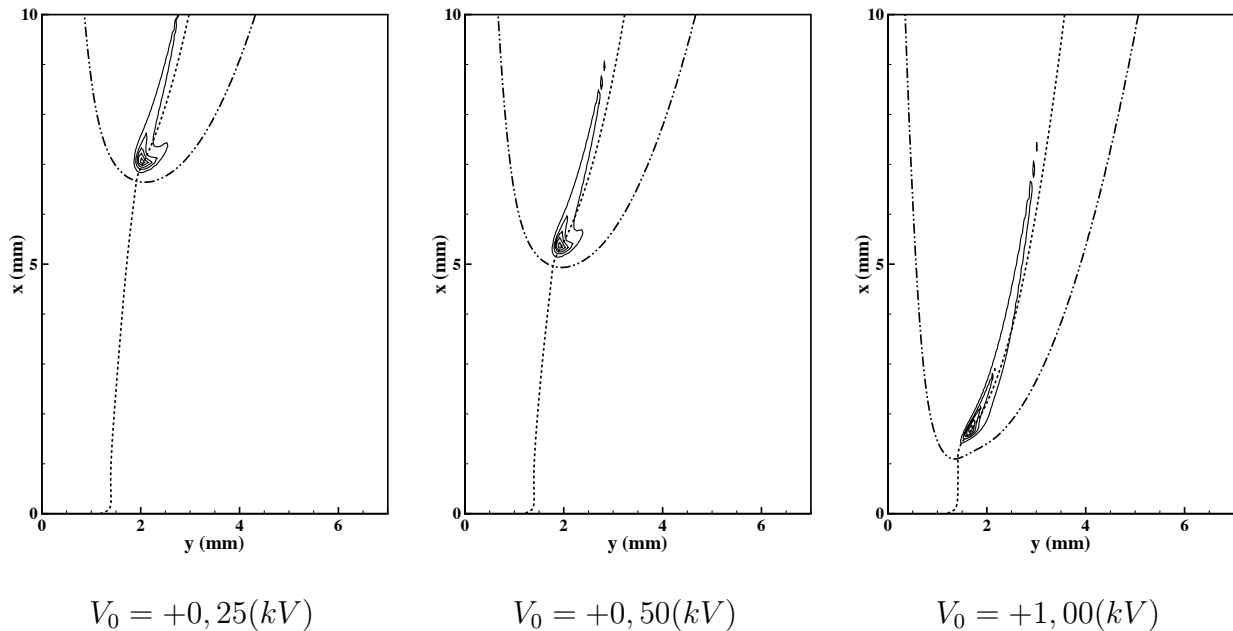


Figure 7.10 – Rapprochement de la base de flamme de l'axe central de l'injecteur avec l'augmentation de la tension appliquée. (ligne) : terme source de dégagement de chaleur, (ligne pointillée) : ligne stœchiométrique, (ligne mixte) : $Y_c = 0,005$.

Temps d'établissement : La variation du temps de l'établissement de la nouvelle position de la flamme avec la tension appliquée est exposée dans la figure 7.11. Ce temps correspond au temps écoulé entre l'instant où le potentiel est appliqué et l'instant où la flamme a atteint sa nouvelle position de stabilisation. Quelque soit la polarité du champ électrique imposé, deux caractéristiques de ce paramètre peuvent être notées : une augmentation puis une diminution avec l'accroissement de la tension électrique.

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

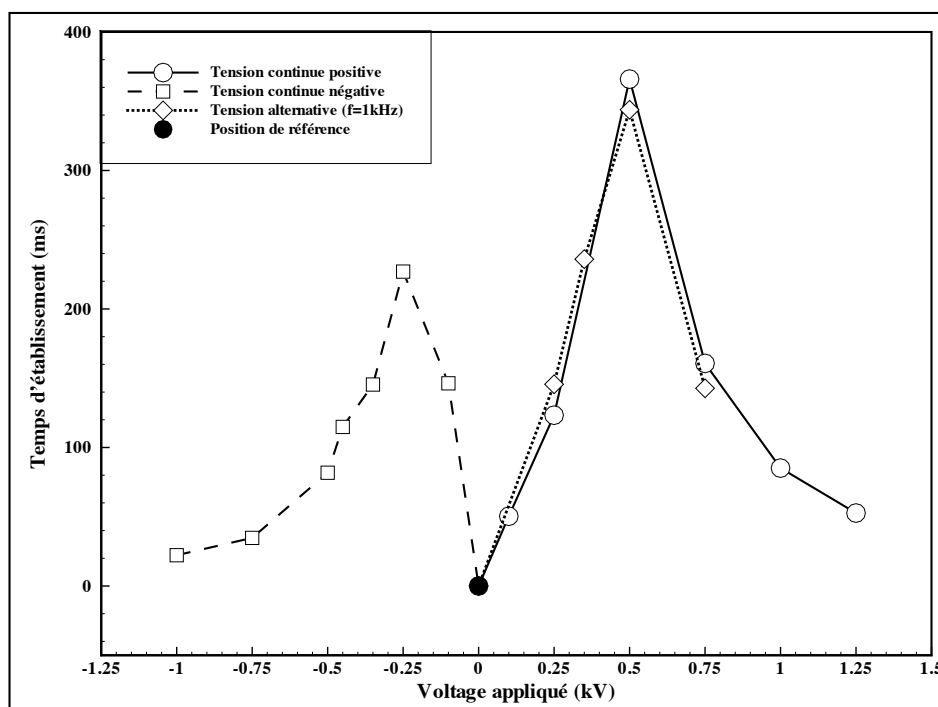


Figure 7.11 – Variation du temps d'établissement de la hauteur de suspension, après l'application du champ électrique, avec la tension appliquée.

Pour les voltages inférieurs à une certaine valeur, qui dépend une fois de plus du type de la polarité appliquée, le temps d'établissement augmente avec l'augmentation de la tension électrique, puisque la flamme parcourt une distance plus grande (cf. figure 7.8). Pour les potentiels supérieurs à cette valeur, alors que la base de flamme parcourt une plus grande distance, le temps d'établissement diminue avec l'augmentation de la tension appliquée. Également, à partir de la valeur limite maximale pour laquelle la flamme se stabilise sur le sillage créé par la lèvre de brûleur, on constate que la distance de déplacement de la flamme, qui est par ailleurs pratiquement constante, est parcourue plus rapidement à chaque fois qu'on augmente le voltage. En effet, puisque la quantité de mouvement transférée à l'écoulement des gaz est plus importante pour les potentiels plus élevés, la flamme se déplace plus rapidement vers l'injecteur (cf. figure 7.12).

De ces dernières remarques, on peut conclure que le temps d'établissement de la nouvelle position de stabilisation est un compromis entre la distance parcourue par la flamme et la vitesse avec laquelle la flamme se déplace vers l'injecteur. Ces deux paramètres sont, tous les deux, contrôlés par l'intensité du champ électrique appliqué.

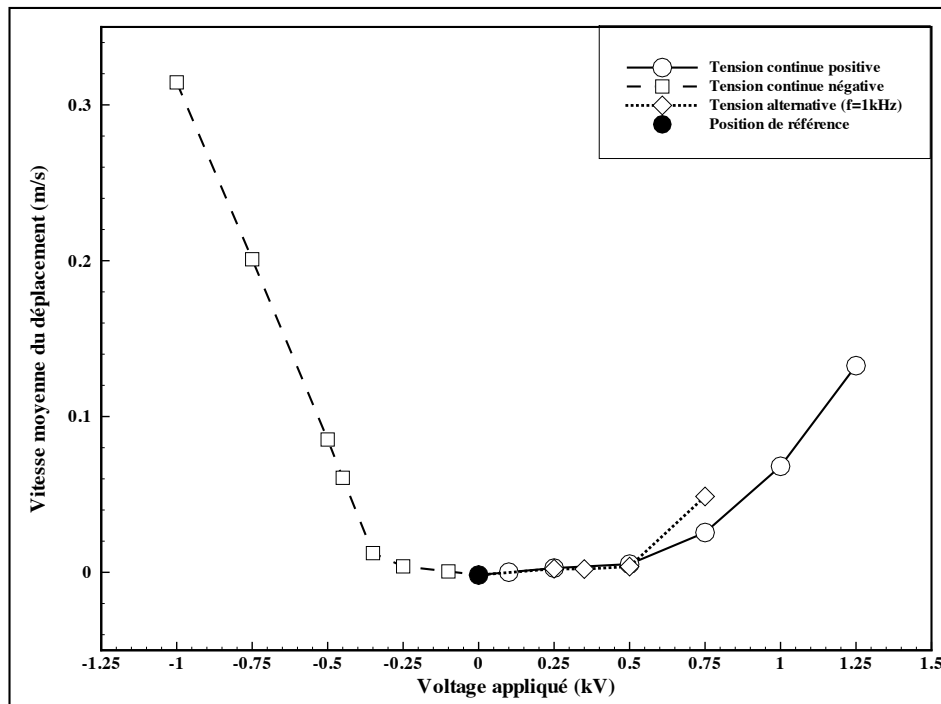


Figure 7.12 – Évolutions de la vitesse moyenne du déplacement de la flamme en fonction de la tension appliquée.

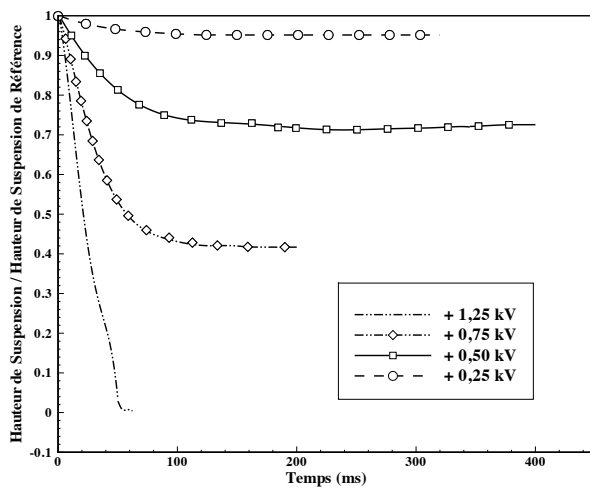
Vitesse moyenne du déplacement : Pour vérifier cette dernière conclusion, nous avons calculé la vitesse moyenne avec laquelle la flamme s'est déplacée de sa position de référence à sa nouvelle position causée par l'application du champ électrique. Elle est définie comme la variation de la hauteur de stabilisation de flamme (distance parcourue) divisée par le temps d'établissement. L'évolution de cette caractéristique en fonction de la tension appliquée est présentée sur la figure 7.12. D'une manière générale, cette quantité et la distance parcourue par la flamme (cf. figure 7.8) augmentent, toutes les deux, avec l'accroissement du voltage utilisé. Ce qui confirme la conclusion précédente concernant l'évolution du temps d'établissement, qui représente par ailleurs le rapport de ces deux paramètres.

7.2.1.3 Évolution temporelle de la position de la pointe de flamme après l'application du champ électrique

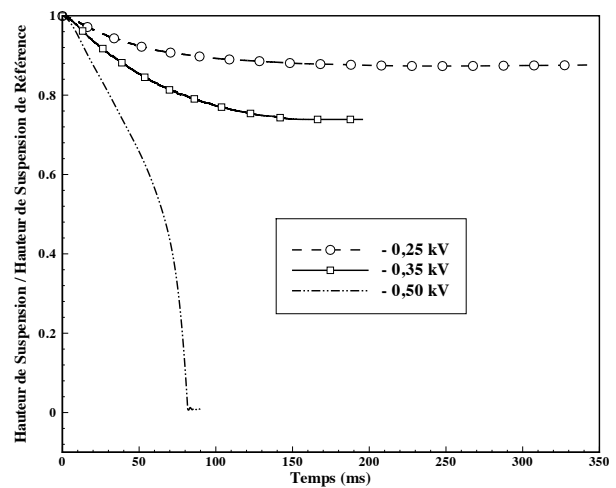
L'évolution temporelle de la hauteur de suspension après l'application du champ électrique, pour différentes tensions et polarités électriques, est exposée sur la figure 7.13. D'une manière générale, deux types d'évolution peuvent être observés. Le premier type concerne les tensions électriques qui engendrent des forces électriques de faibles et moyennes intensités menant à la stabilisation de la flamme loin du sillage créé par la lèvres de l'injecteur. Durant ce type

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

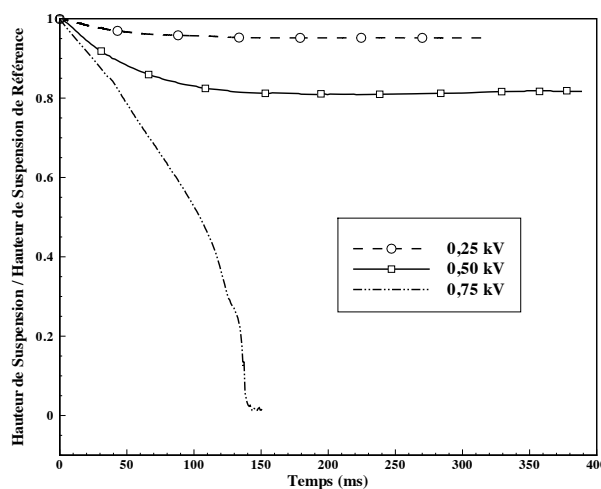
d'évolution, la vitesse avec laquelle la flamme avance vers l'injecteur diminue jusqu'à s'annuler à la nouvelle position de stabilisation. Dans cette zone, la force électrique induite ne peut plus diminuer la quantité de mouvement des gaz frais en dessous de la valeur permettant à la flamme de se propager vers l'avant. Ceci est logique, puisque la flamme, en se déplaçant vers l'injecteur, rencontre des vitesses de plus en plus élevées. Dans le deuxième type, qui concerne les forces électriques de fortes intensités, la vitesse de mouvement de la flamme ne cesse d'augmenter jusqu'à ce que la flamme arrive sur les lèvres de l'injecteur. Cette accélération de la flamme



-Polarité continue positive-



-Polarité continue négative-



-Polarité alternative ($f = 1 \text{ kHz}$)-

Figure 7.13 – Évolution temporelle de la hauteur de suspension de la flamme pour différentes tensions électriques.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

peut être justifiée par l'accroissement de la force électrique avec l'avancement de la flamme vers l'injecteur. En effet, la pointe de flamme est équivalente à une électrode avec un potentiel du même ordre de grandeur que le potentiel appliqué (cf. section 7.4). Ceci signifie que la chute du potentiel au voisinage de l'électrode inférieure augmente avec l'avancement de la flamme vers l'injecteur, à cause de la décroissance de l'espace entre l'électrode et la pointe de flamme. Par conséquent, la force électrique engendrée en amont de la flamme, pour un même voltage appliqué, est plus importante aux plus petites positions axiales de la flamme.

Dans le cas de la polarité alternative, lorsque la base de flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation, elle présente des oscillations périodiques entre deux hauteurs extrêmes. Ces oscillations, comme le montre la figure 7.14, ont une fréquence synchronisée avec la fréquence du champ électrique. Par ailleurs, leur amplitude dépend de la tension électrique appliquée; néanmoins, elle reste négligeable en comparaison avec la hauteur d'accrochage de la flamme prise comme la moyenne des deux extrema. Par exemple, elle représente environ $4 \times 10^{-3} \%$ de la hauteur d'accrochage pour une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV). Une analyse de ces effets sera donnée avec plus de détails dans les sections 7.3, 7.4 et 7.7. Ce phénomène a été observé également dans les travaux expérimentaux [160, 161].

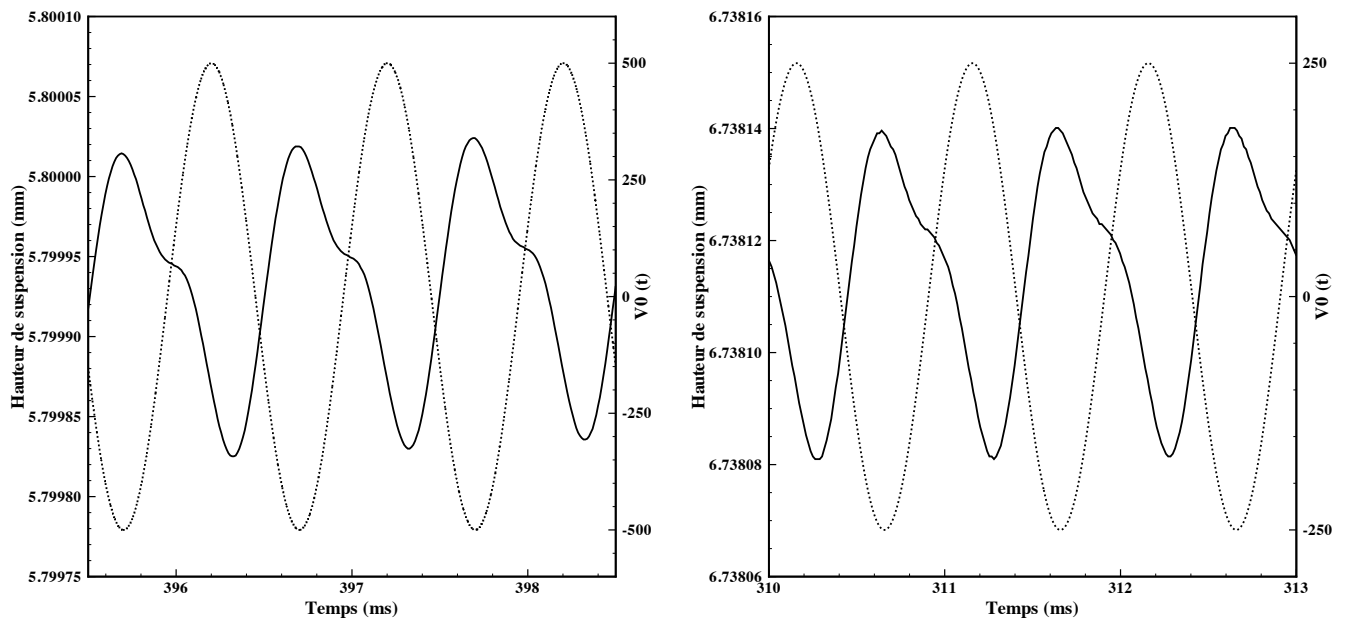


Figure 7.14 – Évolution temporelle de la hauteur de suspension (ligne continue), et du voltage appliqué (ligne pointillée), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz). (gauche) : $V_0 = \pm 500$ V, (droite) : $V_0 = \pm 250$ V.

7.2.2 Impact du champ électrique sur une flamme qui est soufflée

La possibilité d'utiliser le champ électrique pour stabiliser les flammes, dans des régimes pour lesquels elles seraient normalement soufflées, présente un intérêt important dans la conception des brûleurs.

Les flammes laminaires décrochées, comme celle simulée dans la présente étude, sont fortement sensibles aux changements du débit massique du jet central ou de celui de l'écoulement coaxial. En effet, une légère augmentation de l'une de ces vitesses mène facilement au soufflage de la flamme. Dans la configuration étudiée, les valeurs de vitesse d'air au-dessus de 1 (m/s) ne permettent pas, au moins dans le domaine de calcul, la stabilisation naturelle de la flamme. La valeur minimale du potentiel électrique à imposer, pour restabiliser la flamme avec une vitesse de l'écoulement coaxial supérieure ou égale à 1 (m/s), a été recherchée. La procédure est la même pour toutes les vitesses d'air testées : (1) la flamme est tout d'abord stabilisée avec les conditions du cas-test de référence, (2) la vitesse de l'écoulement coaxial est augmentée jusqu'à une vitesse cible (égale ou supérieur à 1 m/s), (3) lorsque la valeur maximale du terme source du dégagement de la chaleur se situe à une hauteur de 10 (mm) (5 diamètres de l'injecteur), un champ électrique de polarité positive est appliqué, et la valeur seuil minimale du potentiel permettant l'arrêt du soufflage de la flamme est enregistrée.

Sur la figure 7.15, la valeur seuil de la tension électrique de polarité positive stoppant le soufflage est tracée en fonction de la vitesse de l'air. Dans l'intervalle de vitesse d'air allant de

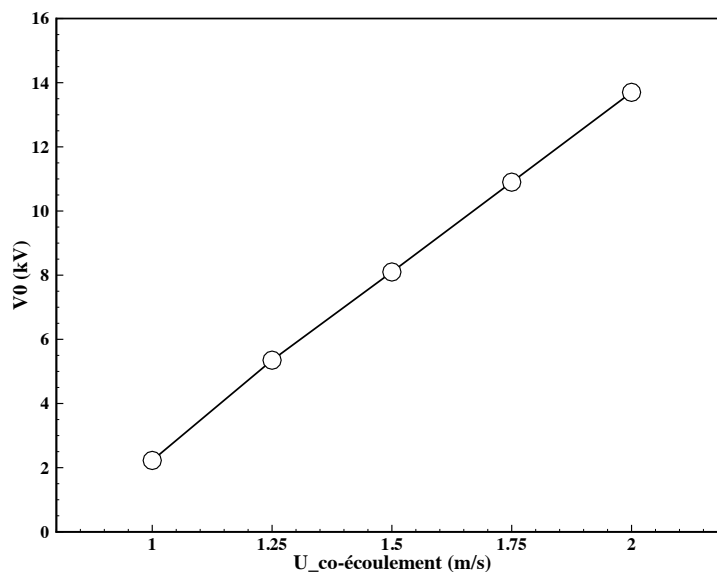


Figure 7.15 – Variation de la valeur seuil (minimale) de la tension nécessaire pour améliorer la stabilisation de la flamme avec la vitesse de l'écoulement coaxial.

1 jusqu'à 2 (m/s), la relation entre les deux quantités est linéaire. En augmentant encore la vitesse de l'air au-delà de la valeur de 2 (m/s), des potentiels électriques de valeurs plus grandes pourraient également assurer la stabilité de la flamme. Cependant, puisque la base de la flamme est équivalente à une électrode du rayon de courbure faible (pointe), le potentiel appliqué ne peut pas dépasser une limite supérieure. En effet, pour des valeurs assez grandes du potentiel, une décharge couronne pourrait se produire entre la pointe de la flamme et l'électrode placée au niveau de l'injecteur, ce que le présent modèle ne peut pas traiter.

En résumé, dans les simulations réalisées, une vitesse d'air aussi élevée que 5,2 fois la vitesse de la flamme plane laminaire à la stœchiométrie ($S_L^0=0,38$ m/s) a pu être atteinte tout en ayant une flamme stable. On peut conclure donc que le champ électrique a la capacité d'étendre largement les limites de stabilité des flammes. Cette conclusion est en accord avec les travaux de Kim et al. [154] ou encore ceux de Won et al [156].

Il a également été remarqué que le potentiel, qui doit être appliqué à la flamme pour la stabiliser, augmente avec la hauteur atteinte par la flamme au moment de l'application. Cela implique que l'intensité de la force électrique imposée à l'écoulement des gaz est contrôlée, non seulement par l'intensité et le type de la polarité appliquée, mais également par la distance entre la base de la flamme et l'électrode située au niveau du plan de l'injecteur. Ce résultat important rejoint les observations expérimentales de Botova et al. [152].

7.2.3 Apparition des instabilités

Lorsque la tension électrique est augmentée jusqu'à une certaine valeur (par exemple : +1,25 kV en polarité positive ou -0,5 kV en polarité négative), des instabilités apparaissent (voir les figures 7.16 et 7.17). L'amplitude de ces instabilités ainsi que l'instant du début de leur apparition dépendent de l'intensité de la force électrique induite, qui est par ailleurs contrôlée essentiellement par le voltage et le type de polarité de la tension appliquée (cf. figure 7.32).

Comme le montre les figures 7.16 et 7.17, après un certain temps de l'application du champ électrique, qui dépend donc de l'intensité et la polarité imposées, des oscillations de faible amplitude commencent à apparaître. Tout d'abord, ces instabilités sont visibles le long du front de flamme intérieur (branche prémélangée riche). Par la suite, ces premières instabilités s'amplifient avec l'avancement de la flamme vers l'injecteur, en résultat de l'augmentation de la chute du potentiel électrique au voisinage de l'électrode inférieure. Ainsi, de fortes perturbations au niveau du front de flamme extérieur (branche prémélangée pauvre) se développent. De telles instabilités, causées par le champ électrique, ont été observées dans plusieurs études expérimentales [155, 163].

7.2 Comportement de la flamme en présence du champ électrique

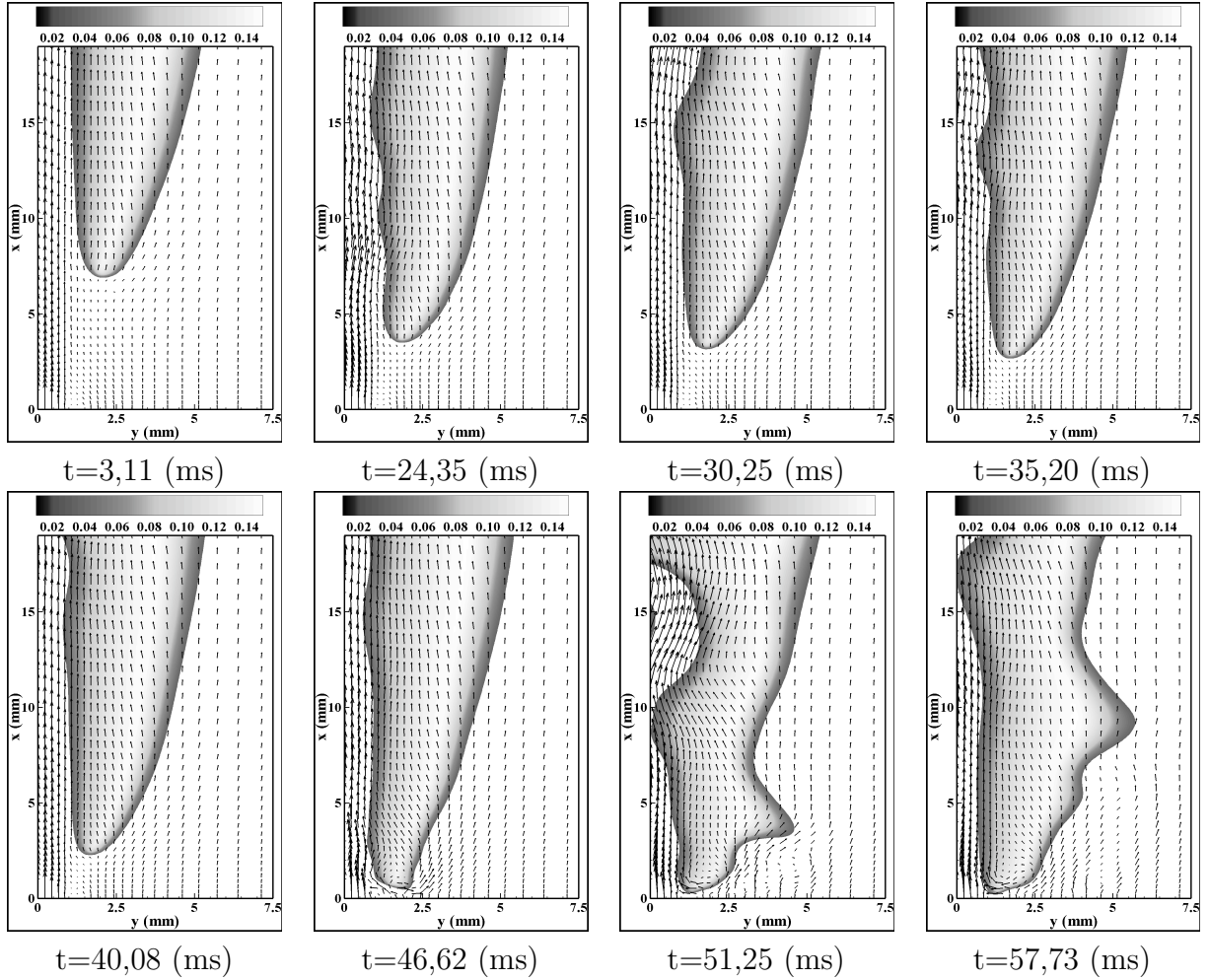


Figure 7.16 – Champ de la variable d’avancement et des vecteurs vitesse, à différents instants après l’application d’une tension continue positive de $V_0=+1,25$ (kV). Apparition des instabilités.

Ce mode d’instabilités peut être comparé à celui des instabilités thermo-diffusives qui dominent la structure du front de la flamme laminaire prémélangée d’un nombre de Lewis inférieur à l’unité [34, 194, 195] (voir figure 7.18). Dans ces flammes, la diffusion moléculaire des réactifs est plus élevée que la diffusivité thermique ($Le < 1$). Par conséquent, lorsque le front de flamme est convexe vers la région des gaz frais, puisque la diffusion des réactifs vers les gaz brûlés est plus rapide que celle de la chaleur vers les gaz frais, les réactifs sont chauffés et brûlés plus rapidement. Ce processus augmente la vitesse locale de la flamme, qui est plus élevée que la vitesse du front de flamme plane ($S_L > S_L^0$). De l’autre côté, pour les parties de front qui sont convexes vers les gaz brûlés, les réactifs diffusent dans une large zone et la vitesse de flamme est diminuée en comparaison avec la vitesse laminaire de la flamme plane ($S_L < S_L^0$). Cette situation, illustrée sur le côté gauche de la figure 7.18, est instable à cause du différentiel des

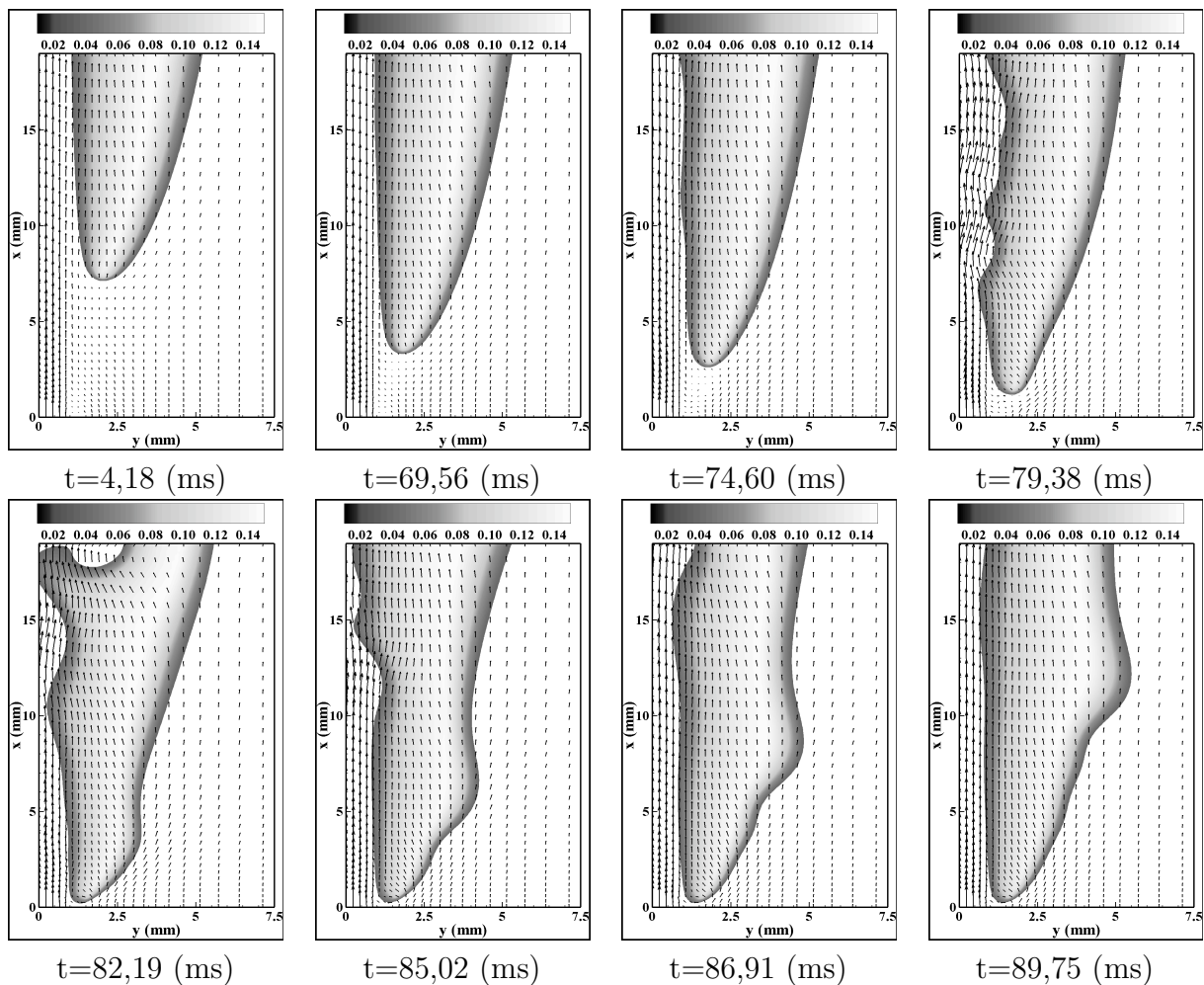


Figure 7.17 – Champ de la variable d'avancement et des vecteurs vitesse, à différents instants, après l'application d'une tension continue négative de $V_0 = -0,5$ (kV). Apparition des instabilités.

vitesse de flamme qui tend à augmenter le plissement du front de flamme.

Dans notre cas, lorsque la tension électrique est accrue, la composante radiale du champ électrique, répartie autour de la pointe de flamme comme montré sur la figure 7.29, devient très importante (voir le cas de $V_0 = -0,75$ kV par exemple). Dans ces zones, la force électrique engendrée dans la direction radiale est alors considérable et peut, selon son signe, augmenter ou diminuer localement la composante radiale de la vitesse des gaz d'une manière significative. Ceci peut être vérifié sur les figures 7.16 et 7.17 montrant le champ des vecteurs vitesse, où on voit une déviation radiale de ces vecteurs dans les endroits du front instables. De ce fait, il résulte une diminution ou une augmentation locale de la vitesse du déplacement du front de flamme, qui devient alors concave dans des régions et plus convexe dans d'autres endroits. Ceci signifie que des parties du front de flamme se propagent dans le sens inverse des autres parties.

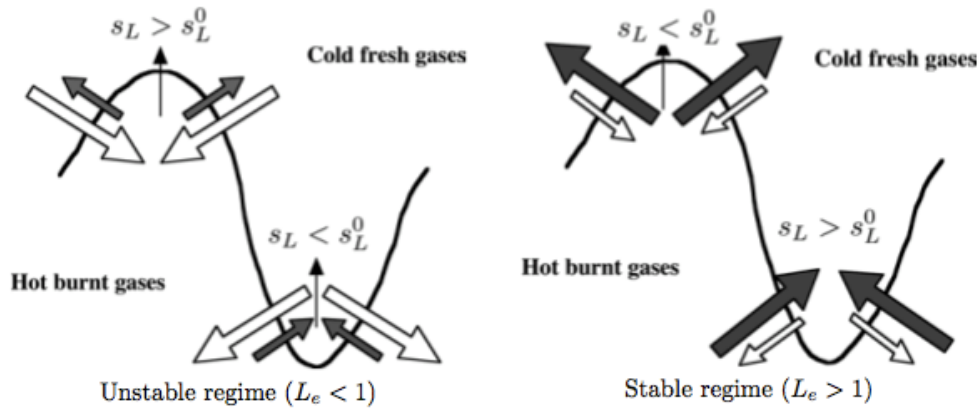


Figure 7.18 – Croquis des instabilités thermo-diffusives [34]. Pour $Le < 1$ (côté gauche), la diffusion moléculaire (flèches vides) est plus importante que la diffusion thermique (flèches remplies), et le plissement du front de flamme est renforcé par le différentiel des vitesses de flamme. Pour $Le > 1$ (côté droit), une flamme stable est obtenue.

Ce différentiel de vitesse conduit donc à l'augmentation du plissement du front de flamme et à l'apparition des instabilités.

7.3 Répartition des espèces chargées

Polarité continue

Les répartitions des ions positifs, des électrons et des ions négatifs, avant et après l'application de champ électrique de différentes intensités en polarité continue positive et négative, sont montrées, respectivement, sur les figures 7.19, 7.20 et 7.21. La concentration des ions positifs dans les flammes d'hydrocarbures proches de la stœchiométrie varie généralement entre 10^{16} et 10^{17} (m^{-3}) [4] (voir section 2.4). Cet ordre de grandeur est en bon accord avec les résultats des présentes simulations.

Avant l'application du champ électrique, les concentrations maximales des ions positifs ($\simeq 2,93 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) et des électrons ($\simeq 2,9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) sont obtenues à la base de flamme (figures 7.19 et 7.20), à l'endroit où le dégagement de chaleur est au maximum. Ceci est attendu, puisque les concentrations des radicaux de chemi-ionisation, CH et O, sont maximales dans cette zone. Les cations subissent, par la suite, des réactions de recombinaison avec les électrons menant à leur dissociation; ce qui justifie la diminution progressive de leur concentration en s'éloignant de la ligne stœchiométrique dans les deux directions : riche ou pauvre.

En ce qui concerne les ions négatifs (figure 7.21), la concentration maximale ($\simeq 6,4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) est obtenue dans la région de basses températures située en amont de la zone de

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

réaction du côté pauvre (air), qui par ailleurs très riche en molécules d'oxygène. Dans cette zone, l'attachement des électrons avec les molécules d'oxygène via les réactions à trois corps pour former les premiers anions est un processus majeur, ce qui justifie donc la concentration importante des ions négatifs. Ces premiers anions réagissent avec les produits neutres issus de la combustion via des réactions de détachement associatif pour former des électrons libres. Ce processus représente une perte considérable d'anions dans la flamme, et peut alors expliquer la faible présence des anions dans les régions de hautes températures.

Après l'application du champ électrique, les concentrations maximales des cations, des électrons et des anions se rapprochent de l'injecteur. Également, les valeurs de ces concentrations maximales, en particulier celle des anions, sont modifiées à cause du mouvement des espèces chargées en résultat de la mobilité électrique. En effet, une classe d'espèces chargées, quelque soit leur nature électrique, est soumise à deux effets opposés ou du même sens, selon le signe de la polarité appliquée. D'un côté, le champ électrique tend à déplacer les anions et les électrons vers l'anode dans le sens inverse du mouvement des cations. De l'autre côté, toutes ces espèces chargées, sont créées à la base de flamme qui est attirée vers la cathode ou l'anode selon que la polarité appliquée est, respectivement, positive ou négative. Ces faits peuvent expliquer donc les variations des valeurs maximales des densités ioniques et de leurs positions par application du champ électrique.

En amont de la zone de réaction, l'intensité électrique induite est importante (cf. figure 7.28). Par conséquent, les ions négatifs, produits principalement dans cette zone, sont fortement convectés par la vitesse électrique (κE) vers l'anode. Ceci explique la modification significative de leur concentration dans cette zone de production. En revanche, les ions positifs et les électrons sont produits essentiellement dans la zone de réaction où l'intensité électrique locale est négligeable (cf. figure 7.28) ; donc leurs concentrations maximales ne sont pas trop affectées par la diffusion électrique.

L'explication qui peut être proposée pour justifier le déplacement de la flamme est que le champ électrique, selon que la polarité appliquée est positive ou négative, induit une accélération, respectivement, des ions positifs ou des ions négatifs vers l'électrode située au niveau du plan d'entrée des gaz. Ces ions subissent des collisions avec les molécules neutres et leur quantité de mouvement est transférée à ces molécules, ce qui permet de ralentir le flux de l'écoulement principal. Les ions sont ré-accélérés par le champ électrique après chaque collision ; par conséquent, chaque ion est responsable d'un grand nombre de collisions. En raison de cette diminution locale de la vitesse d'écoulement, la flamme rencontre des conditions dynamiques favorables pour se propager vers l'injecteur, réduisant ainsi lors de ce processus sa hauteur de stabilisation.

7.3 Répartition des espèces chargées

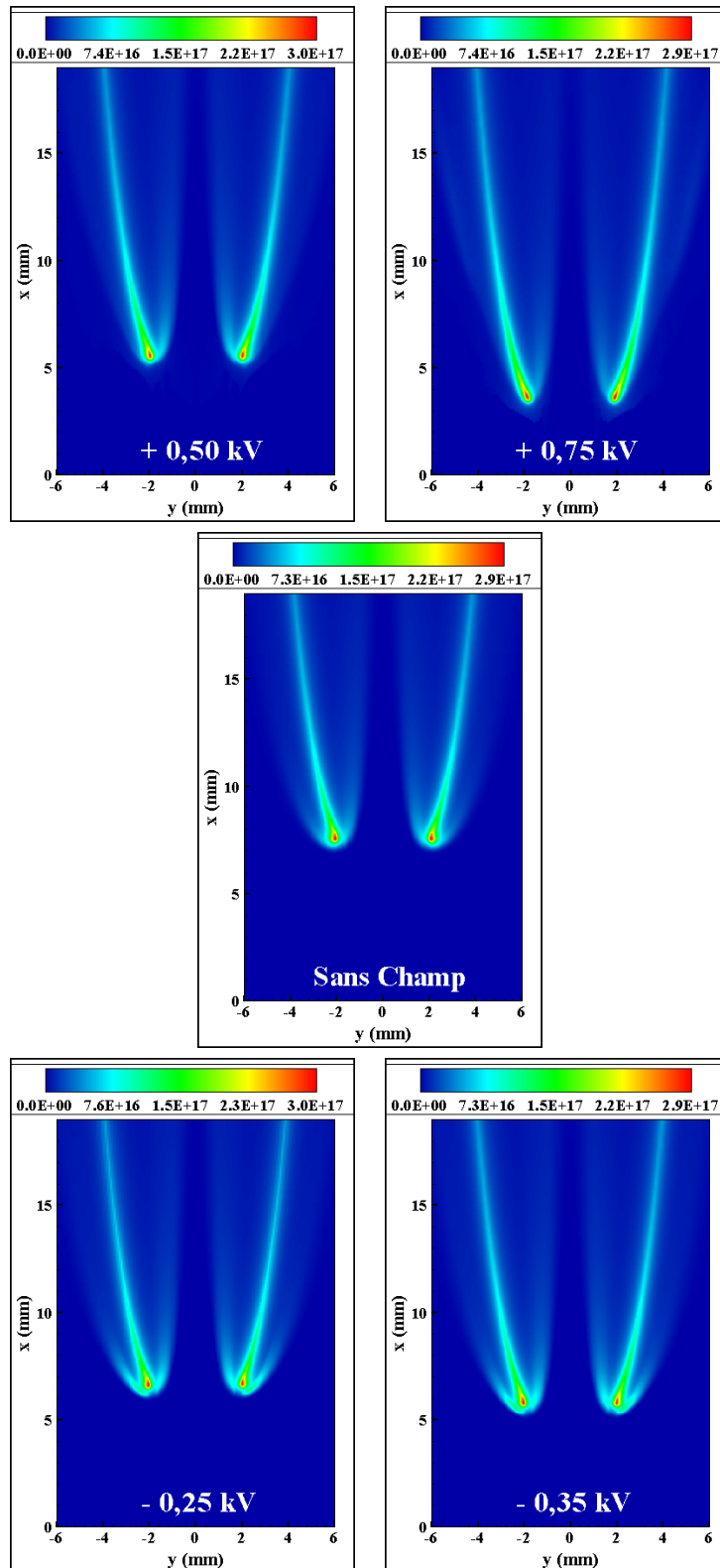


Figure 7.19 – Champ de concentration (par/m³) des ions positifs AVANT et APRÈS l'application du champ électrique pour différentes tensions en polarité continue (positive et négative).

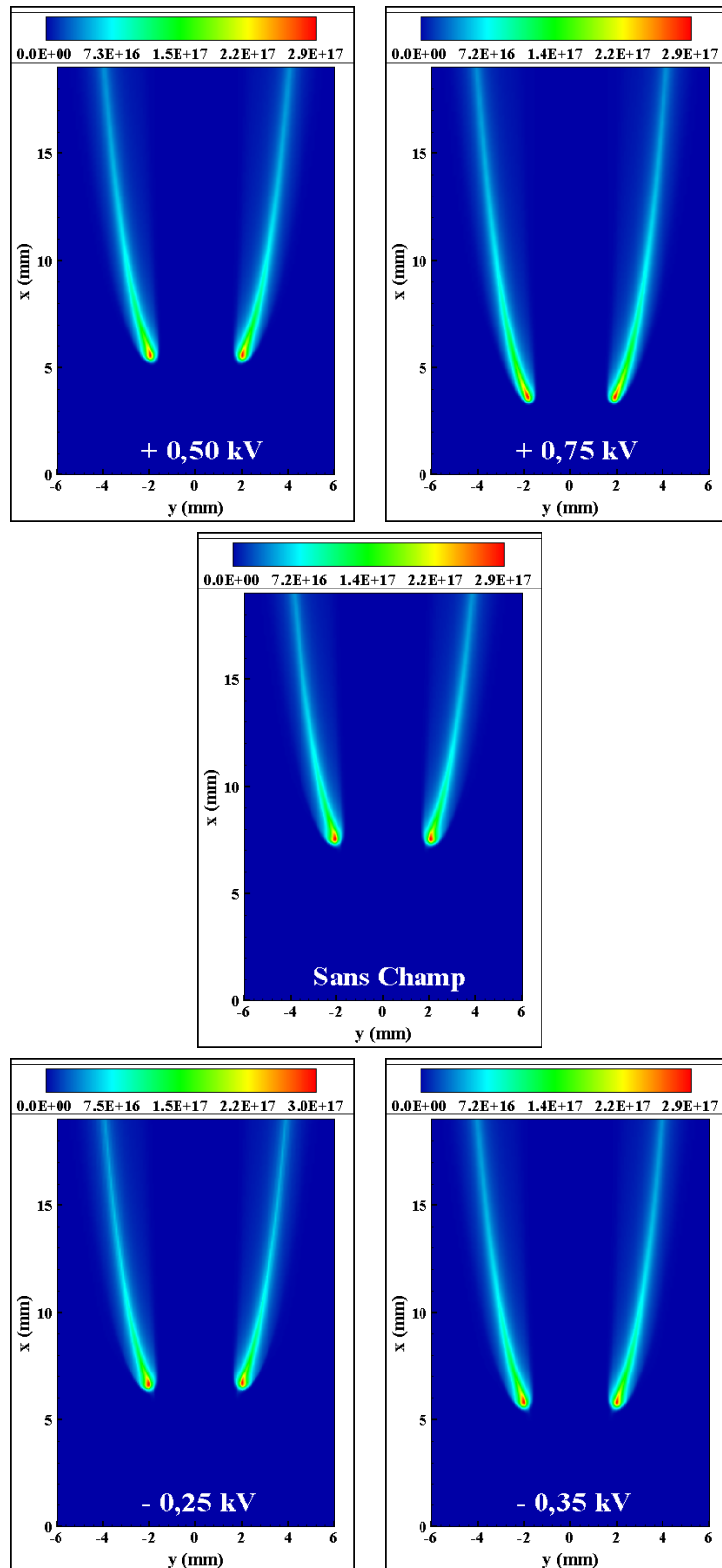


Figure 7.20 – Champ de concentration (par/m³) des électrons AVANT et APRÈS l'application du champ électrique pour différentes tensions en polarité continue (positive et négative).

7.3 Répartition des espèces chargées

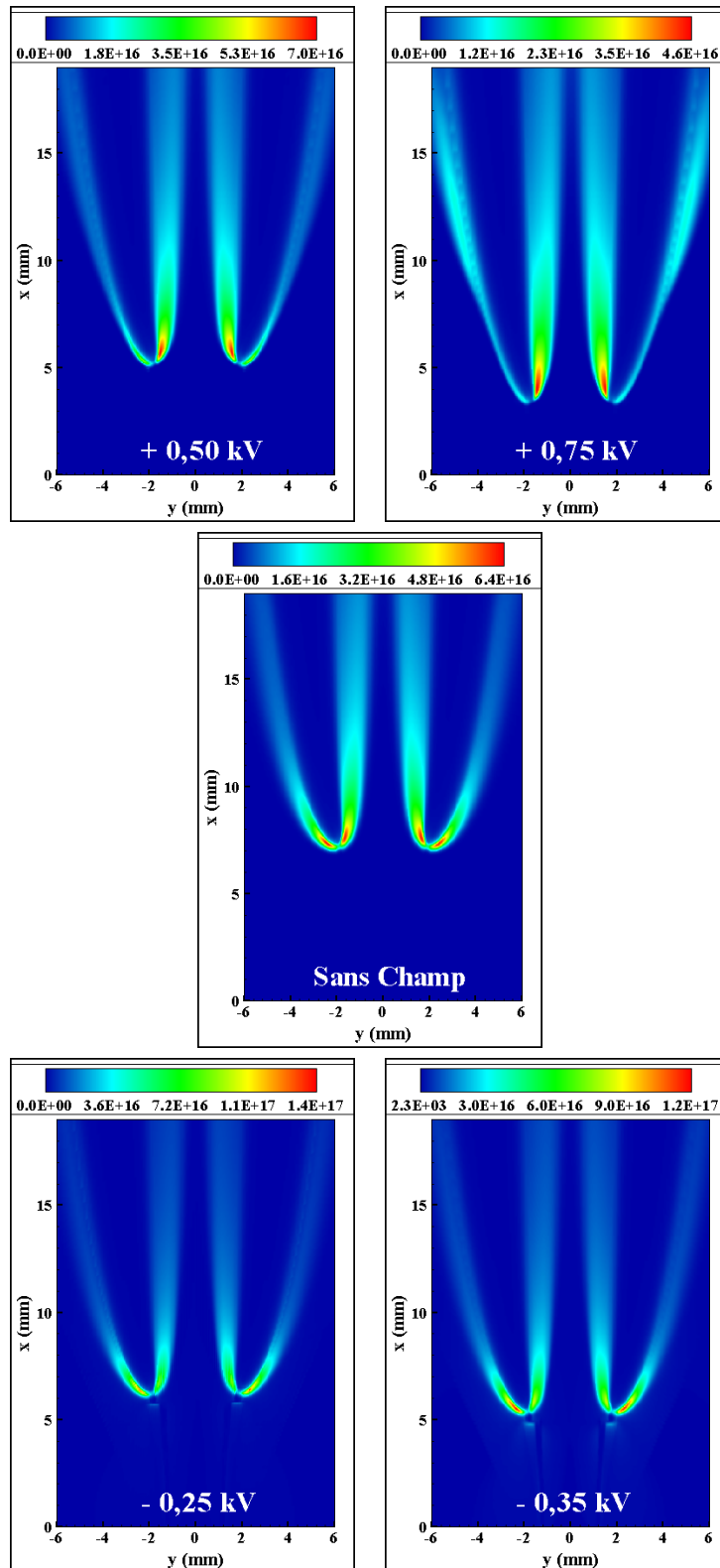


Figure 7.21 – Champ de concentration (par/m³) des ions négatifs AVANT et APRÈS l’application du champ électrique pour différentes tensions en polarité continue (positive et négative).

Polarité alternative

Comme vu précédemment (section 7.2.1.3), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative, sa base oscille entre deux extrema d'une manière périodique (cf. figure 7.14). Cet effet est le résultat de l'évolution de la répartition des espèces chargées en amont de la pointe de flamme. En effet, cette évolution est caractérisée, également, par un processus qui se répète identique à lui-même après un intervalle de temps égal à la période de la fréquence imposée.

Les figures 7.23, 7.24 et 7.25 illustrent la répartition des espèces chargées, à différents instants successifs variant dans un intervalle de temps égal à la période de la fréquence imposée, lorsque la flamme atteint sa position de stabilisation après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz). La figure 7.22 schématise les instants ainsi que les voltages correspondants pour lesquels les distributions des espèces chargées sont tracées.

En polarité alternative, le signe de la tension électrique change d'une manière cyclique : elle est positive pendant une demi-période et négative sur l'autre demi-période. Par conséquent, une classe d'espèces chargées subit, de façon périodique, deux genres de déplacement consécutifs et

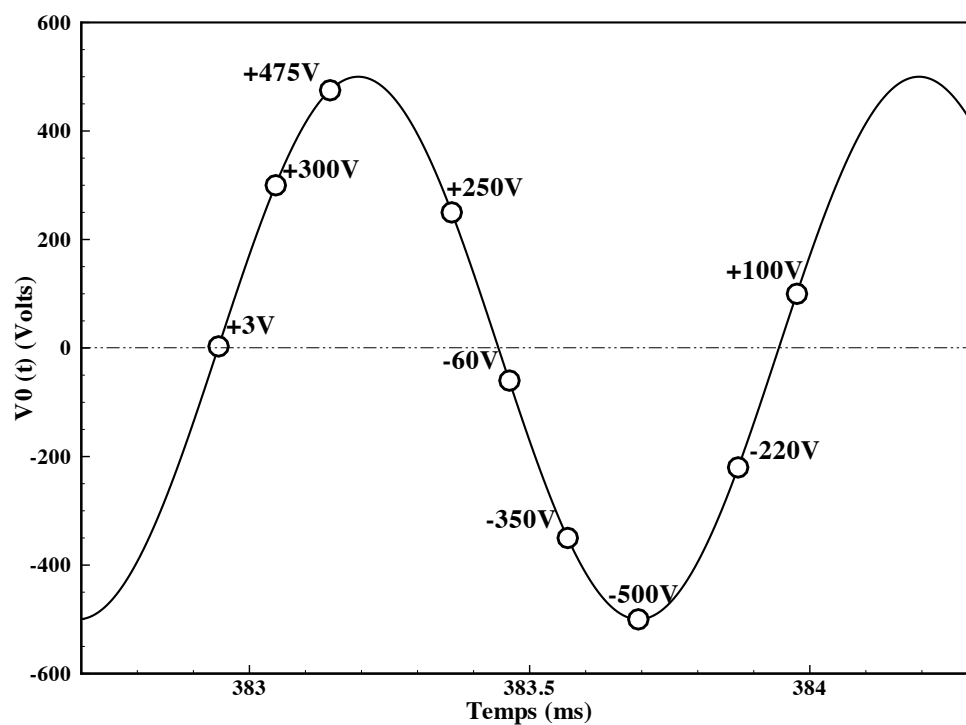


Figure 7.22 – Instants et voltages correspondants pour lesquels les répartitions des espèces chargées (figures 7.23, 7.24 et 7.25) et du champ électrique (figures 7.33, 7.34 et 7.35) sont tracées. $V_0 = \pm 0,5$ (kV) avec $f = 1$ (kHz).

7.3 Répartition des espèces chargées

opposés. D'un côté, quand la tension est positive, les cations se déplacent vers le plan d'entrée des gaz (cathode dans ce cas), simultanément les espèces négatives se sont déplacées vers le plan de sortie (anode). On observe les effets inverses lorsque la tension devient négative.

Au début de la demi-période des tensions positives (figure 7.23, $V_0 = 3V$), alors que les cations se dirigent vers l'électrode inférieure, les espèces chargées négativement, déjà présentes dans la zone située en amont de la base de flamme, commencent à s'échapper vers l'électrode supérieure. À cet instant, cette présence des anions, est causée par la diffusion électrique des tensions négatives antécédentes. Ensuite, puisque la tension positive augmente (figure 7.23, $V_0(t) = +300V$ et $V_0(t) = +475V$), le déplacement des ions positifs vers la cathode est de plus en plus prononcé. En même temps, les anions, sous l'effet de leur diffusion électrique, disparaissent continuellement de la zone en amont de la base de flamme. Après avoir atteint le maximum (+0,5 kV), la tension commence à décroître, réduisant ainsi le nombre de cations extraits de la flamme (figure 7.24, $V_0(t) = +250V$). Simultanément, le nombre d'anions, en amont de la pointe de flamme, continue à diminuer puisque la tension appliquée est toujours positive.

Quand la tension devient négative (début de la demi période négative, figure 7.24 - $V_0(t) = -60V$), les anions réapparaissent à nouveau avec une concentration importante en amont de la base de flamme. Cette réapparition peut être le résultat de deux processus : (1) le déplacement des ions négatifs vers l'injecteur sous l'effet de la tension négative, et (2) la production de nouveaux anions à cause des collisions des électrons, déplacés fortement sous l'effet de leur grande mobilité électrique, avec les molécules d'oxygène qui emplissent l'amont de la base de flamme. Simultanément, les cations reviennent vers la flamme et se condensent dans la zone située juste en amont de la pointe de flamme. Lorsque l'intensité de la tension négative augmente (figure 7.24 et 7.25, $V_0(t) = -350V$ et $V_0(t) = -500V$), le dernier processus d'augmentation du nombre d'anions et de cations en amont de la base de flamme s'intensifie, à cause de l'augmentation de la diffusion électrique des espèces chargées. Après avoir atteint son maximum en polarité négative, l'intensité de la tension électrique commence à diminuer, réduisant ainsi le nombre d'anions dans l'espace entre la flamme et l'injecteur (figure 7.25, $V_0(t) = -220V$). En même temps, la concentration des cations, en amont du point triple de la flamme, continue à augmenter.

Lorsque la tension devient une autre fois positive, le processus des déplacements des espèces chargées décrit dans les paragraphes précédents, se répète identiquement. Ceci peut alors expliquer le caractère oscillatoire de la hauteur de stabilisation de la flamme entre deux valeurs extrémales.

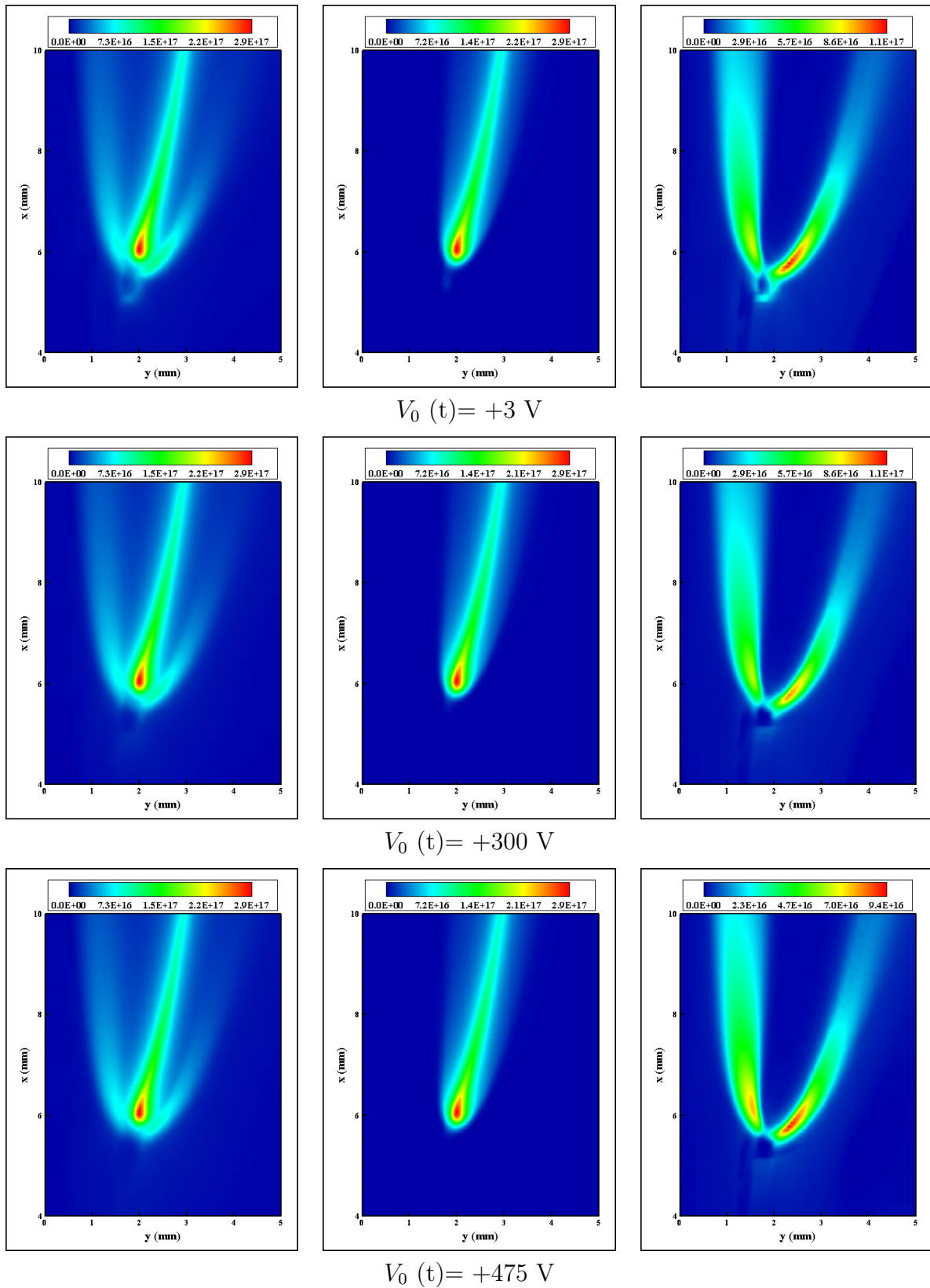


Figure 7.23 – Répartition des espèces chargées (Par/m^3), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation (partie-1). (gauche) : cations, (centre) : électrons et (droite) : anions.

7.3 Répartition des espèces chargées

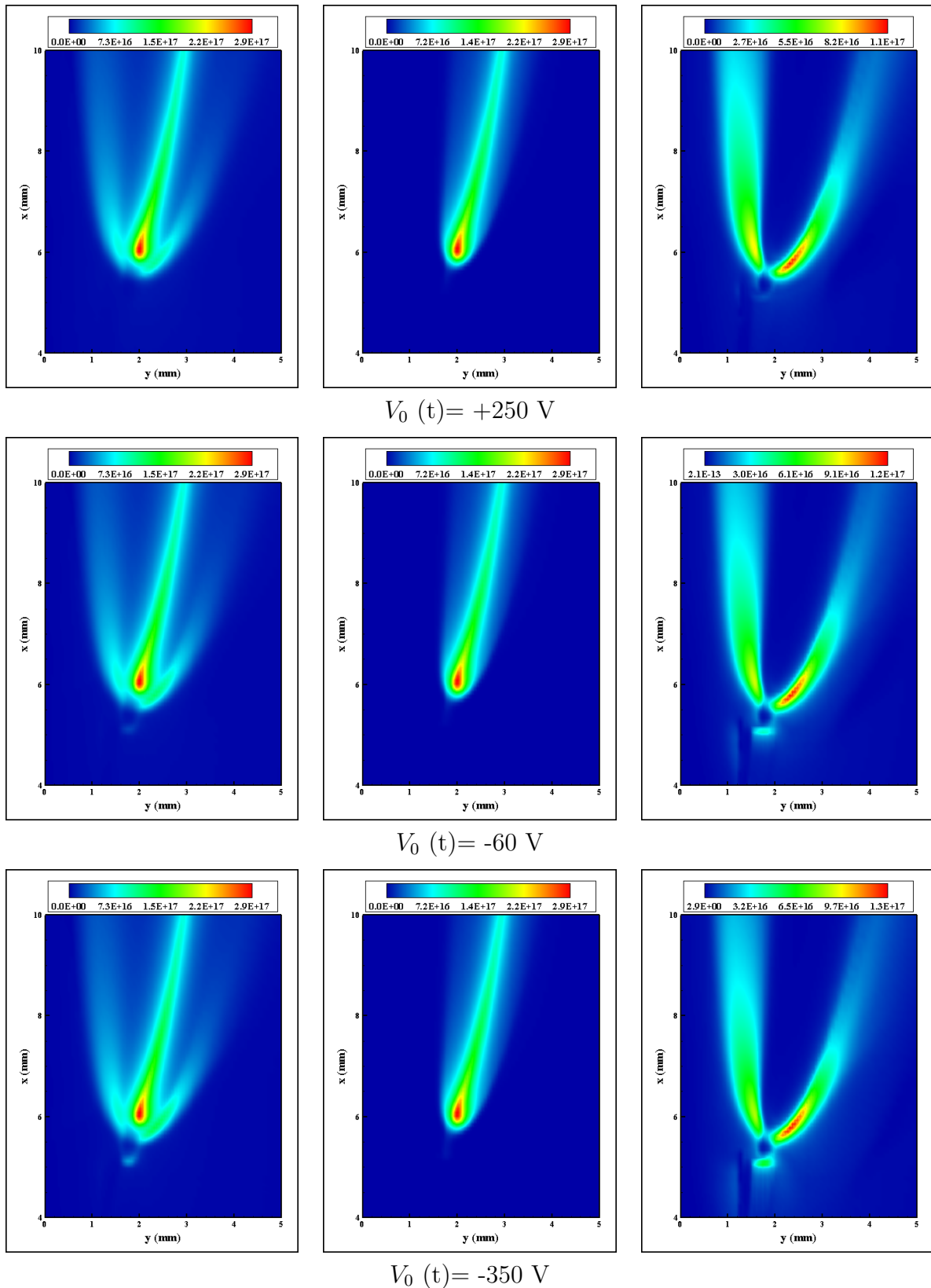


Figure 7.24 – Répartition des espèces chargées (Par/m^3), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation (partie-2). (gauche) : cations, (centre) : électrons et (droite) : anions.

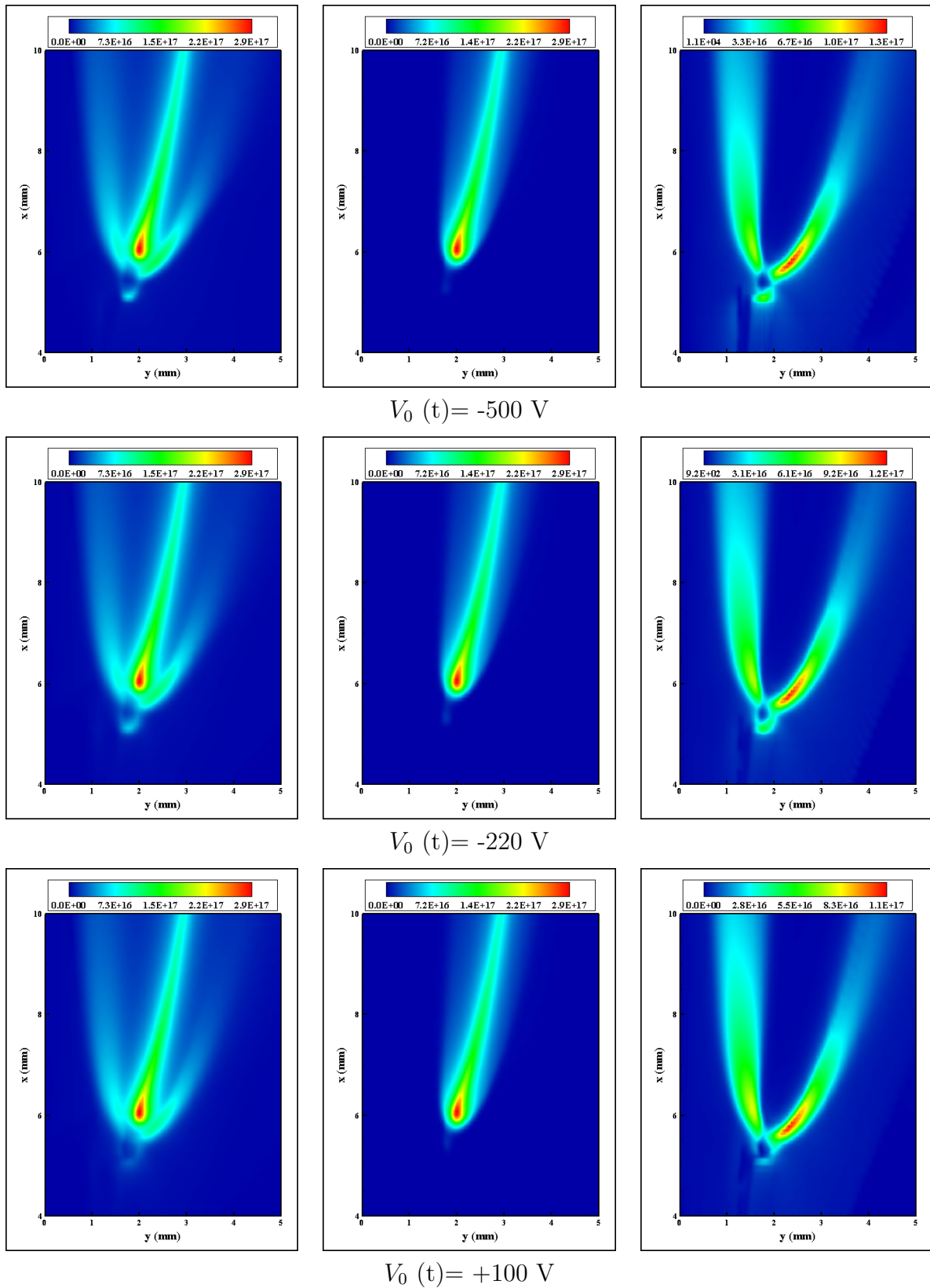


Figure 7.25 – Répartition des espèces chargées (Par/m^3), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation (partie-3). (gauche) : cations, (centre) : électrons et (droite) : anions.

7.4 Répartition du champ électrique

Polarité continue

La figure 7.27 montre la distribution du potentiel électrique pour différentes tensions en polarité positive et négative. D'une manière générale, quelque soit la tension et la polarité imposées, deux zones peuvent être distinguées :

- (1) En aval de la pointe de flamme, où la valeur absolue du potentiel électrique est maximale. Cette zone est globalement équipotentielle avec un potentiel électrique proche de celui de l'électrode supérieure (V_0). Cette quasi-équipotentialité peut être attribuée à l'abondance de la production chimique des espèces chargées par rapport à leur diffusion électrique dans cette zone. Pour toutes les valeurs et les polarités des voltages simulés, un fort gradient dans la région de la pointe de flamme est observé.
- (2) En amont de la pointe de flamme. Dans cette zone, la valeur absolue du potentiel chute brusquement à zéro.

La base de la flamme se comporte, donc, comme une électrode supplémentaire d'une tension du même ordre que la tension appliquée. Ces tendances sont en bon accord avec les observations expérimentales de Criner et al. [115].

L'évolution des valeurs du potentiel de la flamme, extraites à l'endroit où le terme source de dégagement de la chaleur est maximal, en fonction de la tension appliquée est tracée dans la figure 7.26. Sur cette même figure, la variation de la différence absolue entre les deux potentiels :

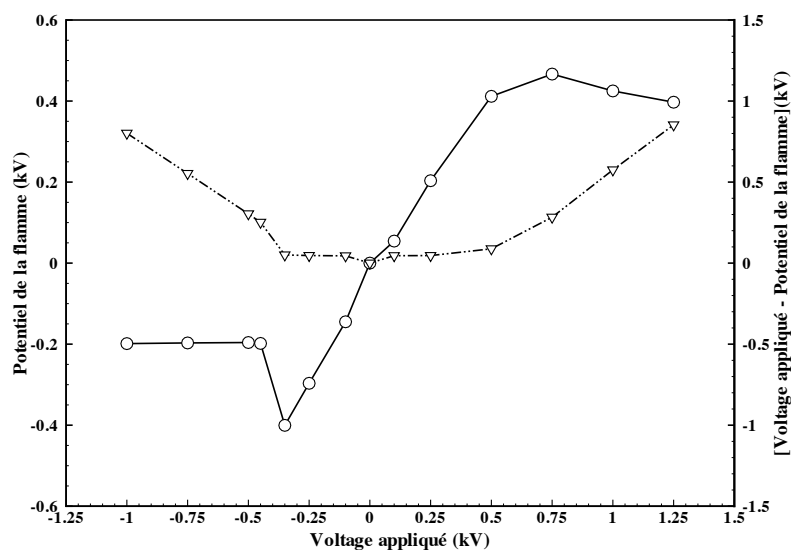


Figure 7.26 – Variation du potentiel de flamme (ligne continue) et de la différence absolue entre le potentiel appliqué et le potentiel de flamme (ligne pointillée) en fonction du voltage appliqué.

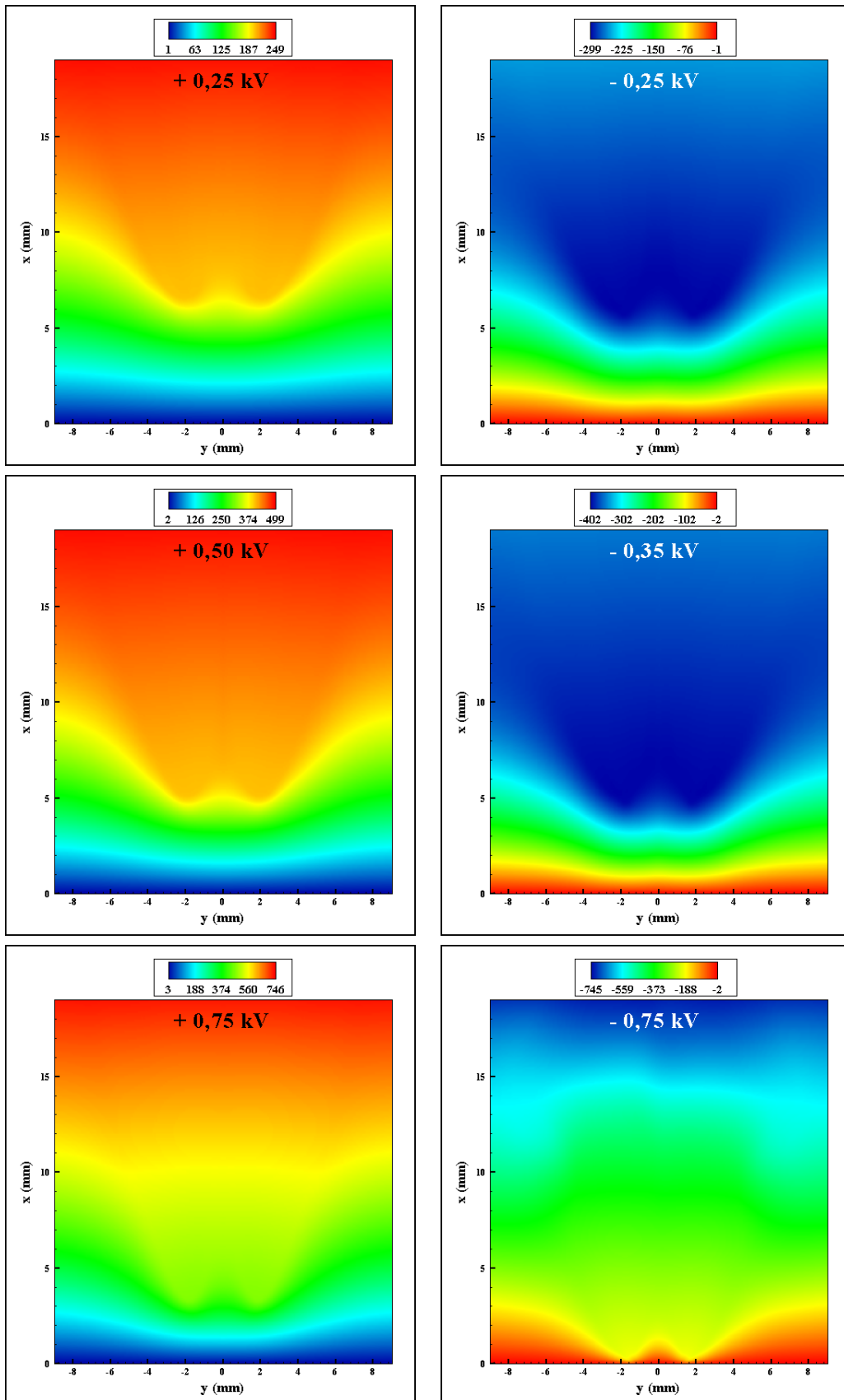


Figure 7.27 – Répartition du potentiel électrique (Volts) pour différentes tensions électriques en polarité continue positive et négative, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation.

de la flamme et celui appliqué est également montrée. D'une manière globale, on constate que la différence entre les deux potentiels augmente avec l'accroissement de la tension appliquée. Ceci peut être attribué à l'augmentation de la distance entre l'électrode de haute tension et la base de la flamme. Lorsque la polarité appliquée est négative, deux constatations peuvent être également faites :

- (1) Pour les tensions relativement faibles ($<0,45$ kV), la valeur absolue du potentiel de la flamme est plus grande que celle du voltage appliqué.
- (2) À plus forte tension, le potentiel de la flamme en valeur absolue est bien inférieur à celui appliqué, et il se stabilise autour de la valeur de $-0,2$ (kV) quelque soit la tension appliquée. Néanmoins, les valeurs de potentiel obtenues lorsque la flamme est très proche de la cathode (<1 mm) pourraient être mises en question, puisque le présent modèle pourrait être trop simplifié pour décrire quantitativement cette interaction.

En effet, trois paramètres peuvent contrôler la valeur locale du potentiel de la flamme : (1) le potentiel appliqué à l'électrode supérieure, (2) la distance entre l'électrode de haute tension et la pointe de flamme, et (3) le signe et la valeur de la différence entre les charges positive et négative dans la zone de réaction. Pour les deux types de polarité continue, la charge électrique ($n^+ - n^-$) est légèrement positive dans la zone de réaction (voir la figure 7.30). Dans cette zone, les cations et les électrons sont produits continuellement, et comme les électrons se déplacent plus rapidement que les cations et que la production chimique des espèces chargées domine leur diffusion électrique dans ces endroits, la différence entre les concentrations positive et négative est alors légèrement supérieure à zéro. Un faible potentiel électrique négatif supplémentaire est donc créé dans cette région. Ce potentiel s'ajoute localement au potentiel appliqué à l'électrode supérieure. Par conséquent, en polarité négative, quand l'espace situé entre l'électrode de haute tension et la base de flamme n'est pas trop important, la valeur absolue du potentiel de la flamme est supérieure à celle appliquée.

Les figures 7.28 et 7.29 présentent les deux composantes, respectivement, axiale et radiale de l'intensité du champ électrique pour différentes tensions continues. Le champ électrique est négligeable en aval de la base de flamme, en raison de la quasi-équipotentialité de cette zone. Comme la valeur absolue du potentiel électrique diminue fortement dans l'espace situé entre la base de la flamme et le plan d'entrée, un fort champ électrique axial est induit. Ce champ pointe dans une direction opposée ou de même sens que la direction principale de l'écoulement, selon que la polarité appliquée est, respectivement, positive ou négative. En ce qui concerne la composante radiale du champ électrique, elle est toujours plus faible que celle axiale. Cependant, elle devient importante pour les tensions accrues et peut modifier fortement la composante radiale de la vitesse des gaz, générant ainsi des instabilités au niveau du front de flamme comme analysé dans la section 7.2.3.

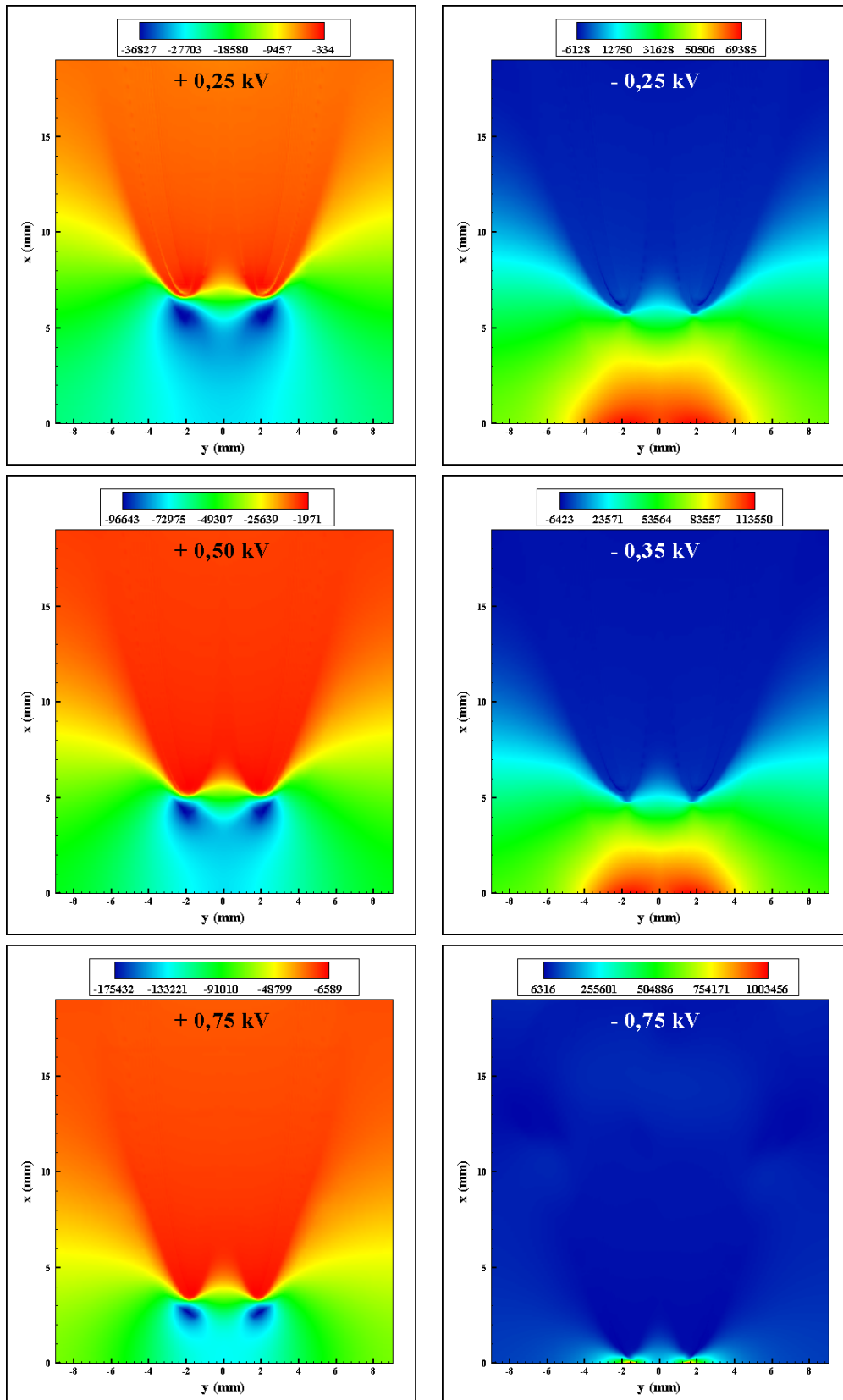


Figure 7.28 – Distribution du champ électrique (Volts/m) : composante axiale, pour différentes tensions électriques en polarité continue positive et négative, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation.

7.4 Répartition du champ électrique

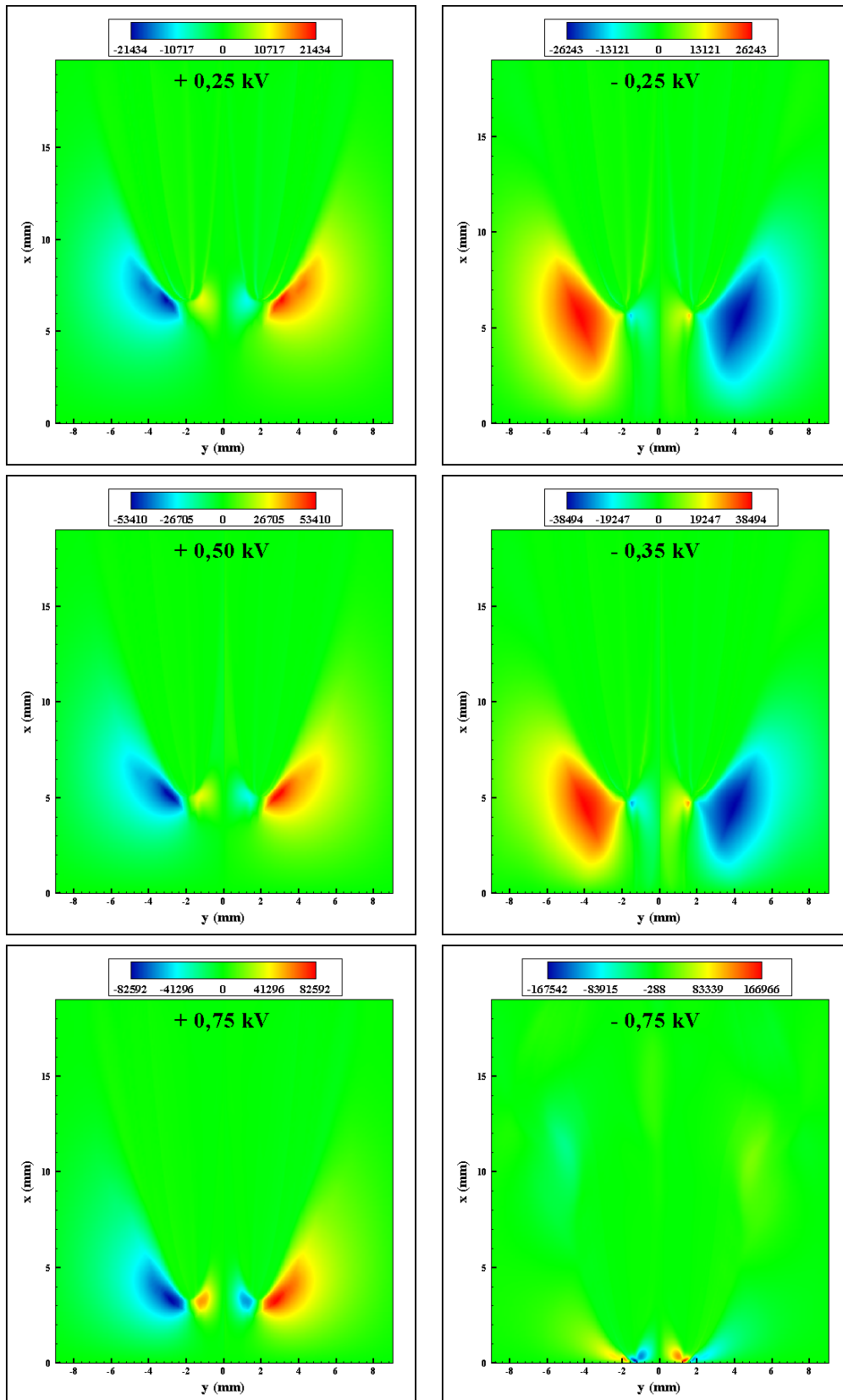


Figure 7.29 – Distribution du champ électrique (Volts/m) : composante radiale, pour différentes tensions électriques en polarité continue positive et négative, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

Comme vu précédemment, lorsqu'un potentiel électrique est appliqué, les espèces chargées négativement se déplacent dans la direction opposée à celle du champ électrique et des espèces chargées positivement. En conséquence, la neutralité électrique locale du gaz n'est plus respectée. La différence entre les concentrations des espèces positives et négatives ($n^+ - n^-$), pour deux cas représentatifs de ce qui se passe en polarité continue, respectivement, positive ($V_0 = +500$ Volts) et négative ($V_0 = -350$ Volts), est montrée sur la figure 7.30. En polarité positive, le déplacement des cations vers la cathode est clairement visible, puisque la charge électrique est positive dans les régions se trouvant en amont de la base de flamme (indiquée dans la figure par l'iso-ligne $Y_c = 0,005$). Dans l'autre polarité, le mouvement des anions vers l'anode est également confirmé; et la charge électrique est maintenant négative en amont de la zone de réaction. Pour les deux polarités, les valeurs absolues maximales de la différence entre les charges positive et négative se trouvent en amont de la pointe de flamme. De petites valeurs sont également présentes dans les gaz brûlés sur les deux côtés : pauvre et riche un peu loin de la ligne stœchiométrique. Toutefois, dans ces régions, les gradients du potentiel sont négligeables et les forces électriques résultantes n'auront pas d'impact. En effet, la force électrique, comme montré sur la figure 7.31, est présente uniquement en amont de la pointe de la flamme, où la séparation de charge et les gradients de potentiel sont importants.

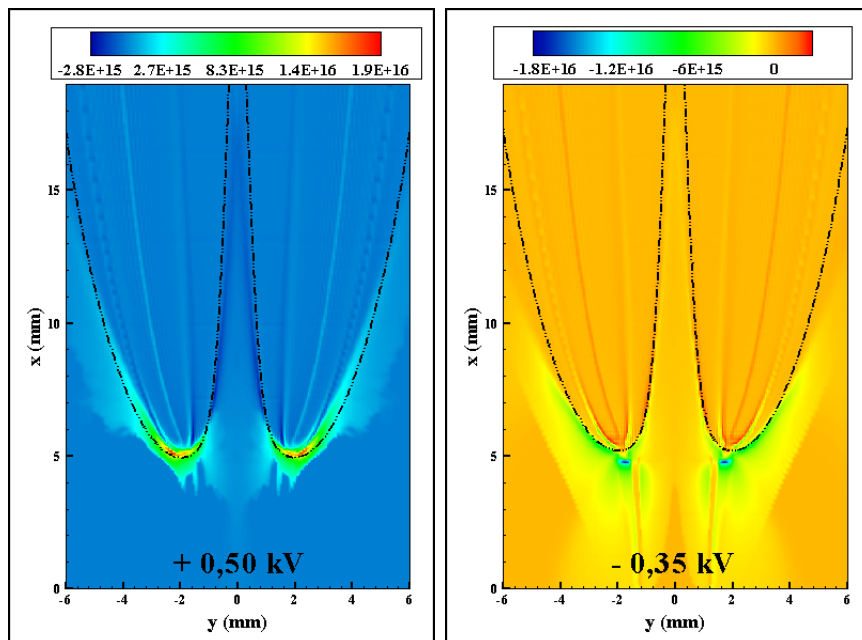


Figure 7.30 – Répartition de la différence entre la concentration positive et la concentration négative ($n^+ - n^-$) (Par/m^3) lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation, (gauche) : polarité continue positive $V_0=+0,5$ (kV), (droite) : polarité continue négative $V_0=-0,35$ (kV). La ligne pointillée représente l'iso-ligne $Y_c = 0,005$.

7.4 Répartition du champ électrique

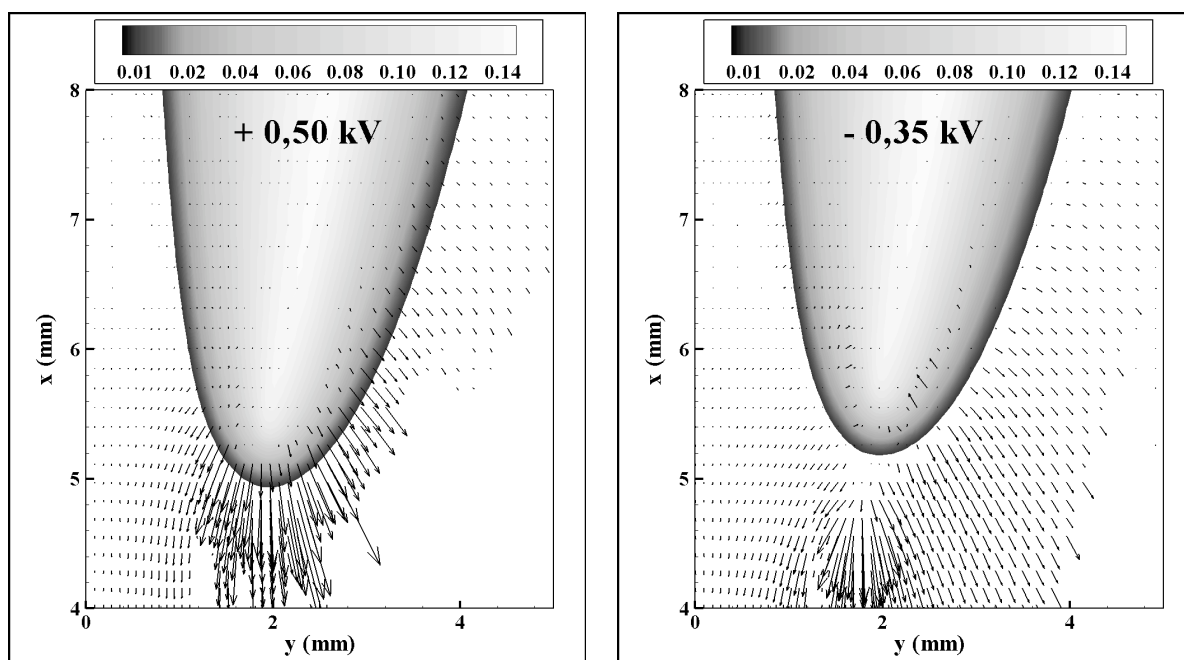


Figure 7.31 – Champ des vecteurs force électrique en amont de la pointe de flamme. (Gauche) : $V_0 = +0,5$ (kV), et (Droite) : $V_0 = -0,35$ (kV).

Autour de la pointe de la flamme, les vecteurs de la force électrique résultante (figure 7.31) sont quasiment perpendiculaires à la surface enveloppant la flamme ($Y_c = 0,005$). Quelque soit le type de la polarité appliquée, cette force, qui est calculée à partir du produit de l'intensité

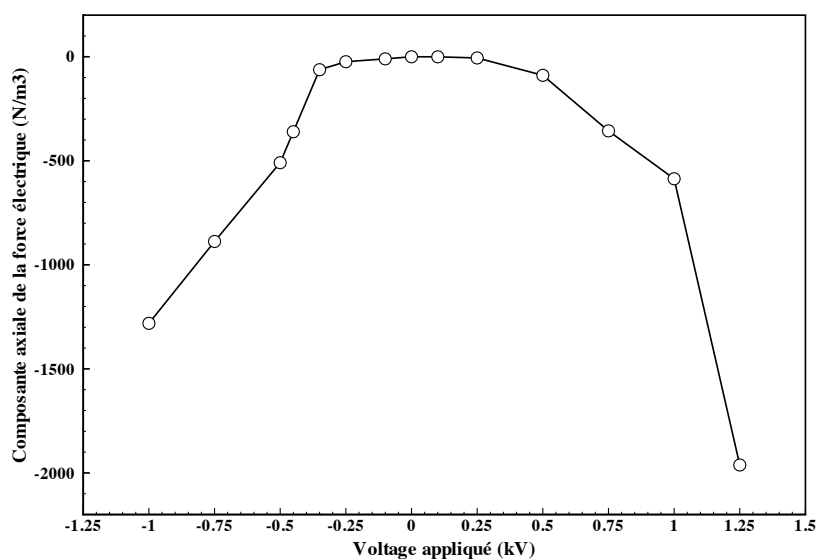


Figure 7.32 – Variation de la composante axiale de la force électrique à la base de flamme, lorsque la flamme atteint sa position de stabilisation, en fonction du voltage appliqué en polarité continue.

électrique et la différence entre les charges positive et négative via l'équation 5.1.1, pointe dans la direction opposée à celle de l'écoulement principal. Elle permet donc de ralentir l'écoulement en amont de la flamme, puis de favoriser sa propagation vers l'injecteur avant sa stabilisation à une hauteur inférieure.

La variation de la composante axiale de la force électrique lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation, extraite à la base de la flamme à l'endroit où $Y_c = 0,005$ et $Z = 0,055$, en fonction du voltage appliqué est exposée sur la figure 7.32. Cette quantité augmente avec l'augmentation de la tension électrique appliquée puisque l'intensité locale du champ électrique est augmentée également (voir figures 7.28 et 7.29). La force électrique caractérise la quantité de mouvement transférée par les espèces chargées à l'écoulement des réactifs ; par conséquent, son augmentation diminue de plus en plus la hauteur d'accrochage de la flamme.

Polarité alternative

La figure 7.33 présente la répartition du potentiel électrique, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation, après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz). La répartition du potentiel change de façon périodique, c'est pourquoi elle est tracée pour différents instants successifs variant dans un intervalle du temps égal à la période (cf. figure 7.22). On voit que les potentiels, sous et dans la flamme, suivent le potentiel électrique de l'électrode (avec un déphasage qui dépend de la fréquence, voir section 7.5). Pour une tension donnée, la forme globale de la répartition du potentiel électrique en polarité alternative est semblable à celle obtenue dans le cas continu. Cependant, pour les valeurs de tension appliquée proches du zéro, du côté positif comme du côté négatif, les valeurs absolues locales du potentiel électrique sous et dans la flamme sont supérieures à celles appliquées. Ceci peut être expliqué par le fait que la séparation de charge dans ces endroits, $(n^+ - n^-)$, qui résulte des tensions antécédentes plus élevées, engendre une tension plus importante que celle appliquée à l'électrode supérieure.

Au vue de l'évolution de la répartition du potentiel électrique et des observations précédentes sur les déplacements des espèces chargées (section 7.3), l'évolution temporelle de l'intensité électrique ainsi que celle de la charge électrique (cf. figure 7.33) est certainement périodique. La force électrique résultante de ces variations, comme le montre la figure 7.35, est toujours opposée à l'écoulement principal venant de l'injecteur. Mais, à cause de la variation du potentiel électrique appliqué et des déplacements des espèces chargées induits, son intensité change aussi d'une manière cyclique entre deux extrema (voir figure 7.36) : tantôt elle augmente, tantôt elle diminue ; ce qui peut expliquer alors les oscillations périodiques de la base de flamme.

7.4 Répartition du champ électrique

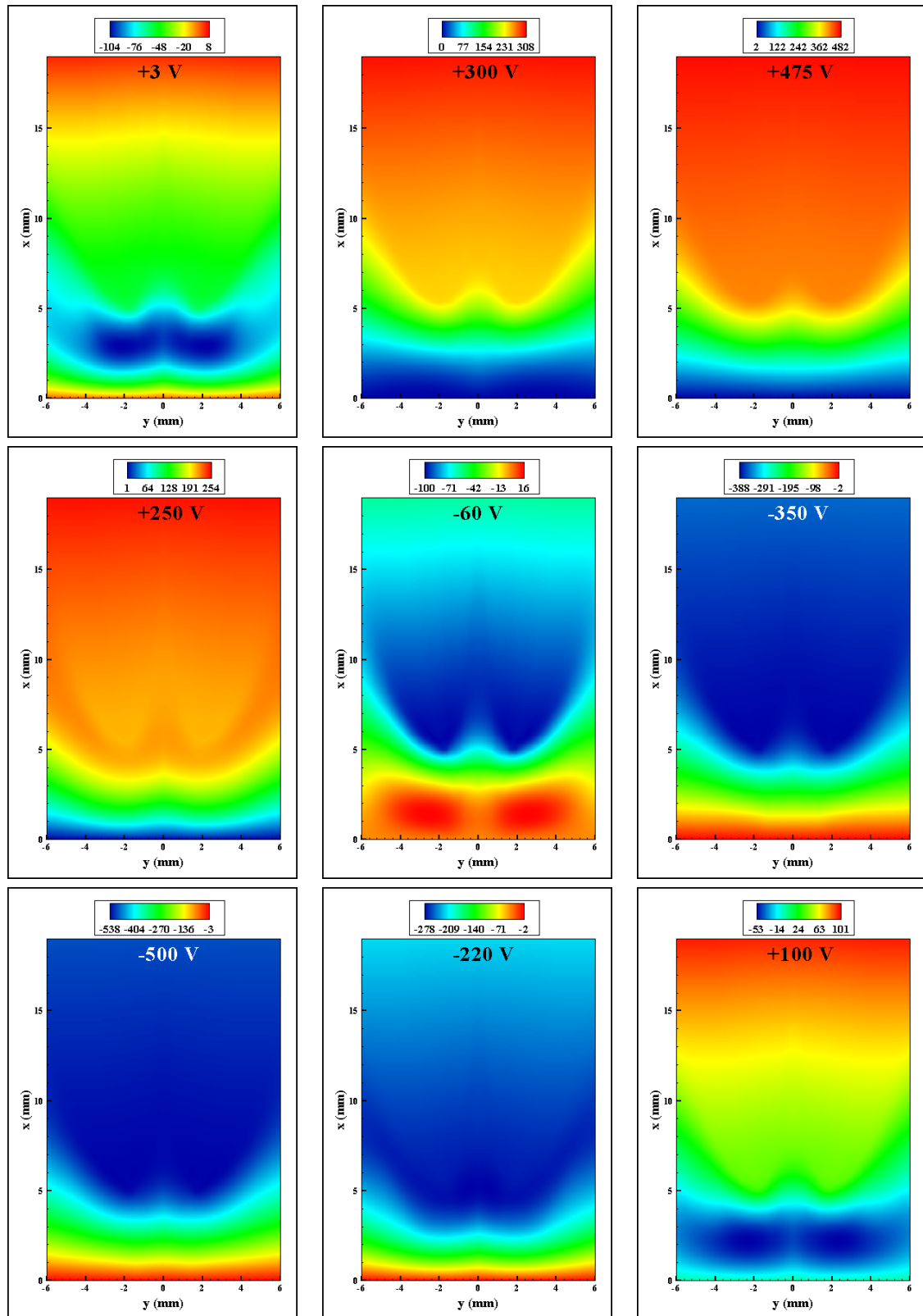


Figure 7.33 – Répartition du potentiel électrique (Volts) lorsque la flamme atteint sa nouvelle position, après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs (voir figure 7.22).

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

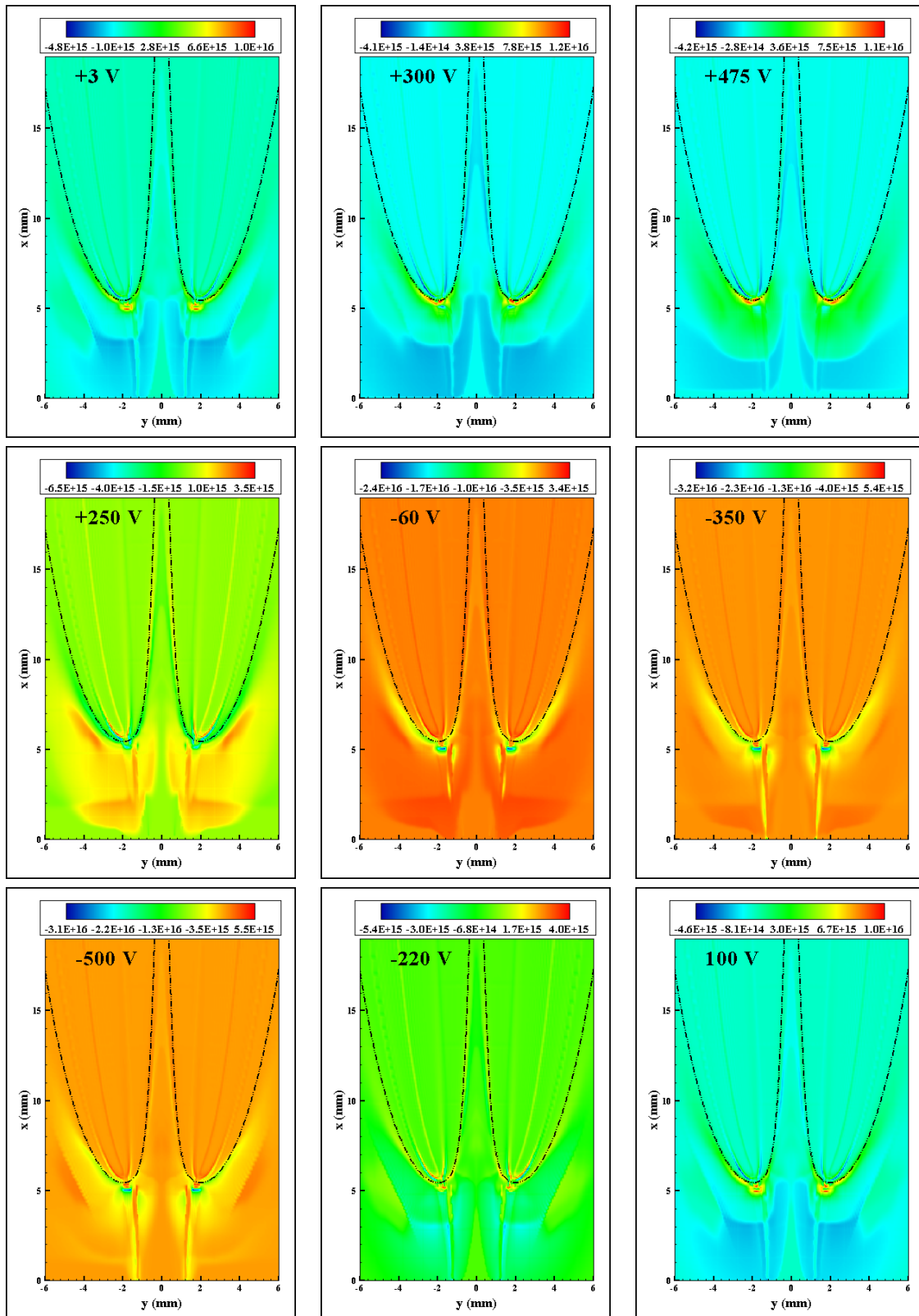


Figure 7.34 – Répartition de la différence entre les concentrations positive et négative (Par/m^3), après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs (voir figure 7.22).

7.4 Répartition du champ électrique

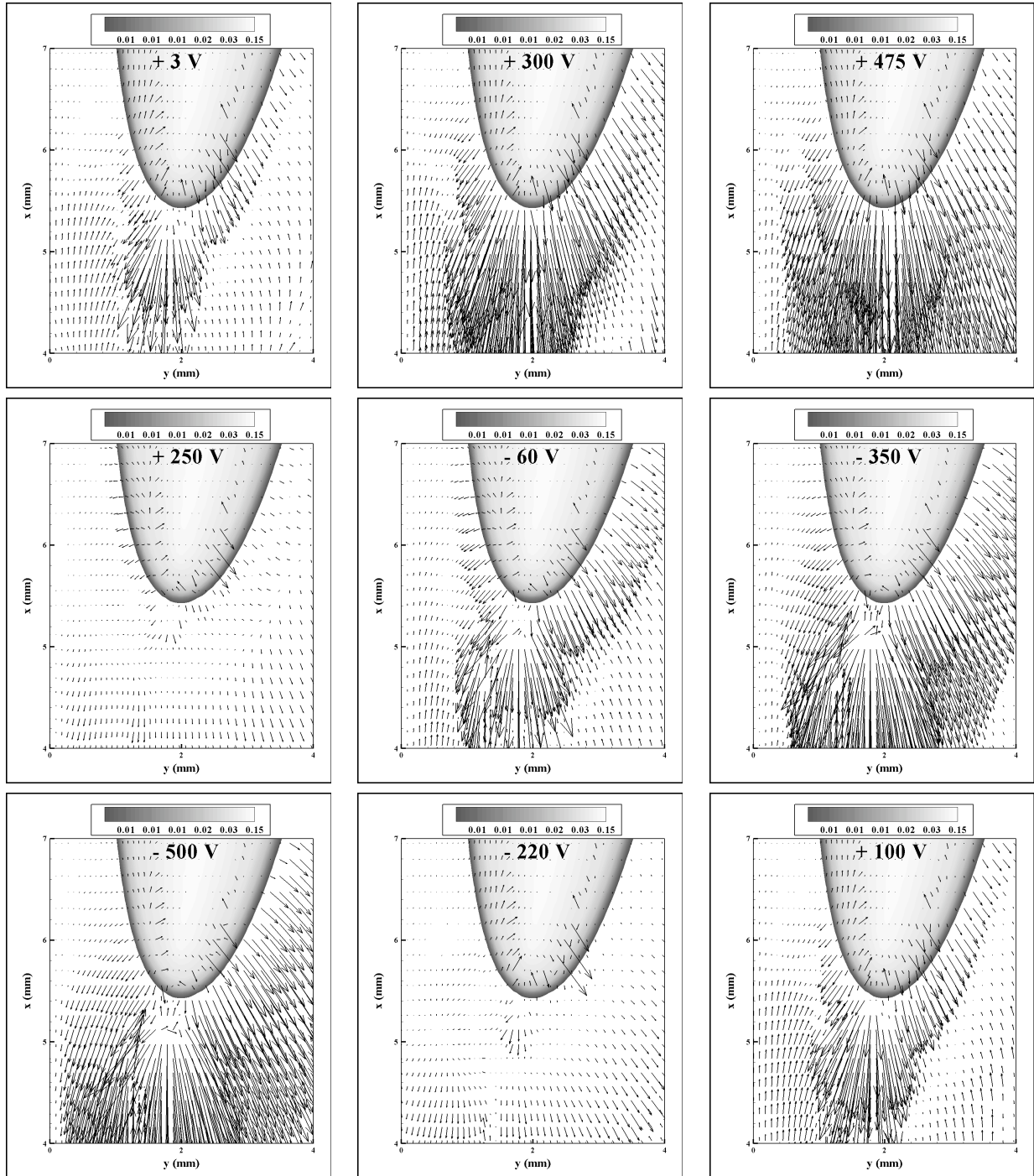


Figure 7.35 – Champ des vecteurs force électrique en amont de la base de flamme lorsque celle-ci atteint sa nouvelle position de stabilisation, après l'application d'une tension alternative de $\pm 0,5$ (kV) avec une fréquence de 1 (kHz), à différents instants successifs (voir figure 7.22).

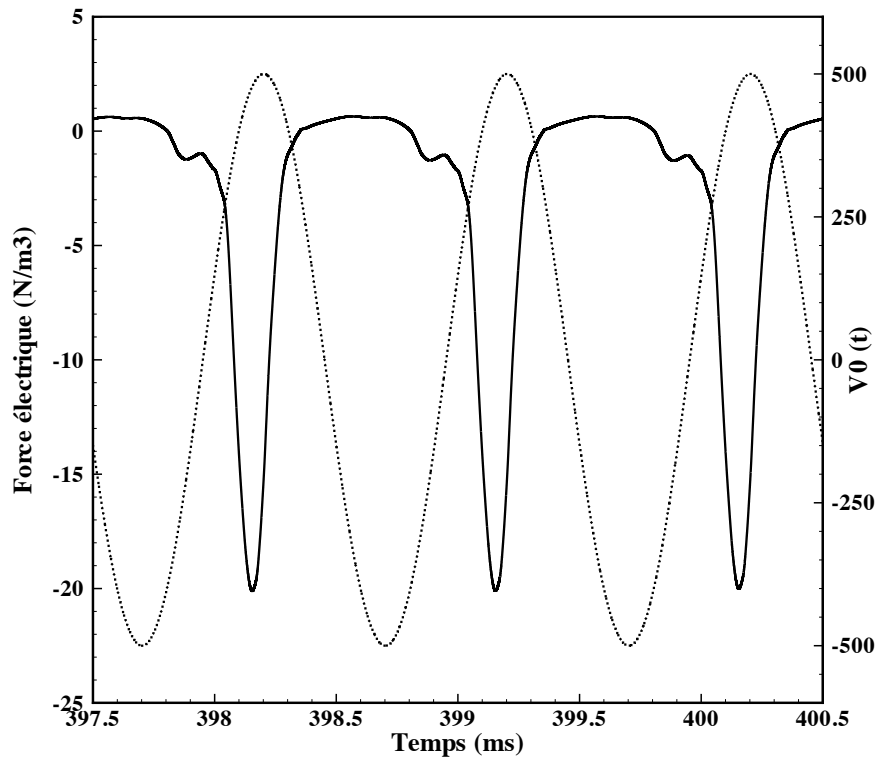


Figure 7.36 – Évolution temporelle de la composante axiale de la force électrique extraite à la base de flamme (ligne continue), et du voltage appliqué (ligne pointillée), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz) et $V_0 = \pm 0,5$ (kV).

7.5 Influence de la fréquence

Pour étudier l'effet de la fréquence sur la hauteur de stabilisation en polarité alternative, trois valeurs ont été testées, respectivement, 0,1, 1 et 10 (kHz), en fixant la tension appliquée à $\pm 0,5$ (kV).

Comme on peut le voir sur le tableau 7.1, qui présente les hauteurs de suspension obtenues pour les trois fréquences, plus la fréquence est grande et meilleure est la stabilisation. Ce résultat rejoint les conclusions de Criner [115].

Fréquence (kHz)	Hauteur de stabilisation	
	Hauteur de stabilisation de référence	
0,1	0,840	
1	0,818	
10	0,701	

Tableau 7.1 – Évolution de la hauteur de suspension en fonction de la fréquence pour une tension alternative appliquée de $V_0 = \pm 0,5$ (kV).

7.5 Influence de la fréquence

Pour comprendre cette influence importante de la fréquence, nous avons tracé l'évolution temporelle du potentiel de la flamme en comparaison avec celui appliqué, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation pour les trois fréquences. Les trois courbes sont présentées sur la figure 7.37. On voit que le potentiel de la flamme suit le potentiel de l'électrode avec un léger déphasage d'autant plus court que la fréquence est importante. Ainsi on voit un potentiel de flamme maximal d'autant plus faible que la fréquence est grande (voir tableau 7.2). Donc, quand on augmente la fréquence, on a des pics de tension plus souvent, mais la tension

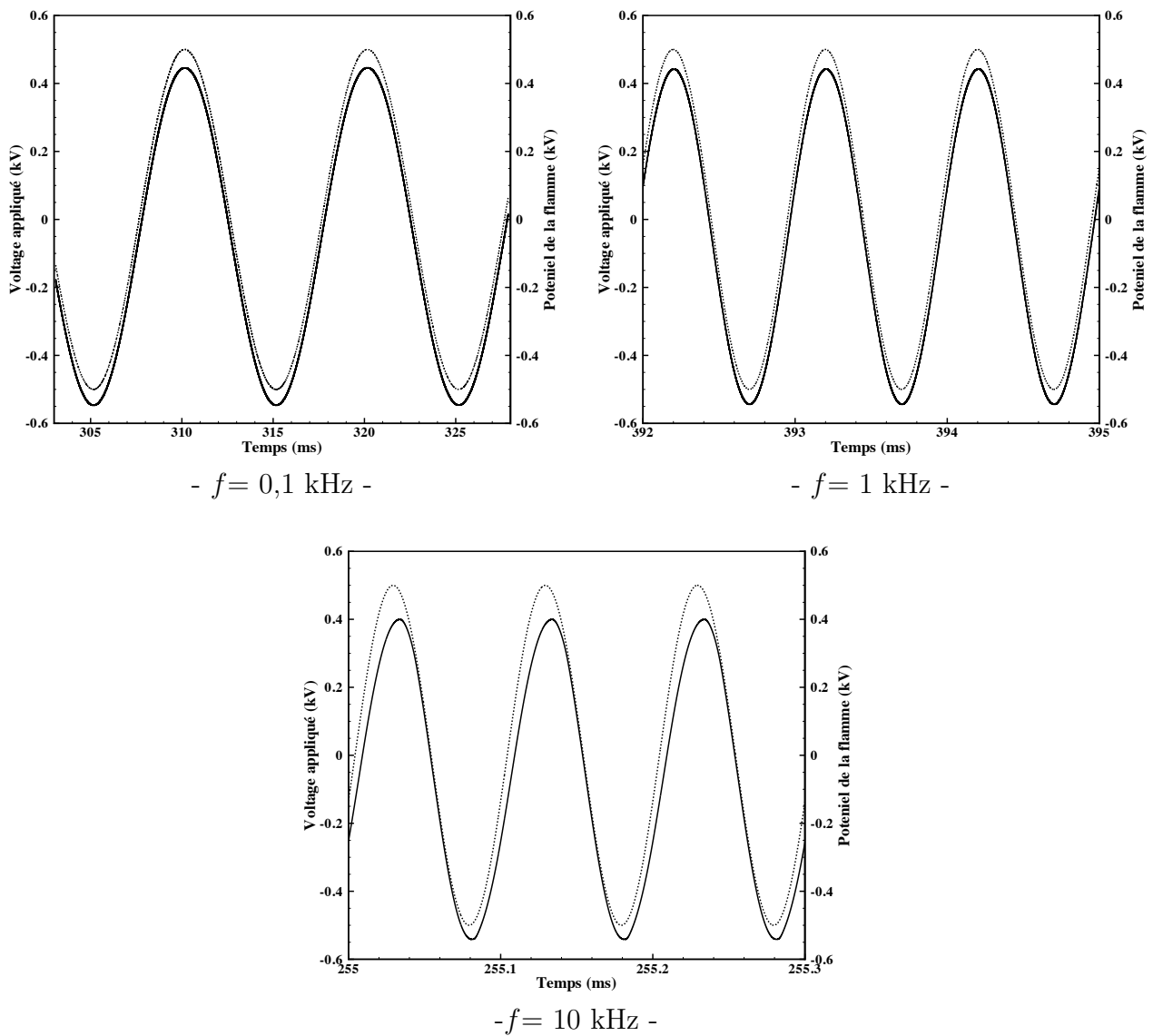


Figure 7.37 – Évolution temporelle de : (ligne pointillée) voltage appliqué, et (ligne continue) potentiel de la flamme, pour différentes fréquences.

maximale de ces pics est d'autant plus faible que la fréquence est grande. Étant donné qu'à potentiel égal, la stabilisation est meilleure pour la fréquence la plus importante, on peut en déduire que la répétition du potentiel est un critère plus important que l'amplitude de ces pics. Ces observations sont cohérentes avec les mesures expérimentales de la thèse de Criner [115].

Fréquence (kHz)	Déphasage (μ s)	Potentiel de flamme maximal (kV)	
		Positif	négatif
0,1	163,208	+0,446	-0,547
1	19,379	+0,442	-0,544
10	1,343	+0,400	-0,541

Tableau 7.2 – Grandeurs extraites à partir des courbes de l'évolution temporelle du potentiel de la flamme.

7.6 Influence de la polarité

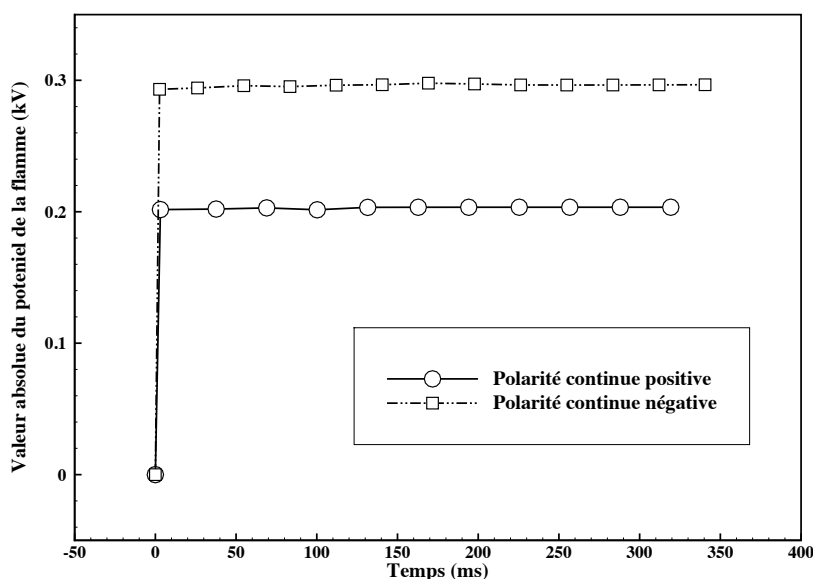
Comparaison tension continue positive / tension continue négative

En comparant les cas continus, on observe une meilleure amélioration de la stabilisation avec la tension négative (cf. figure 7.8). Également, à valeur absolue du potentiel d'électrode égale, la vitesse moyenne avec laquelle la flamme s'est déplacée vers l'injecteur est plus élevée dans le cas négatif (cf. figure 7.12). Pour expliquer ces effets, nous avons tracé les évolutions temporelles de la valeur absolue du potentiel de la flamme pour les deux polarités. Les courbes de ces évolutions sont comparées sur la figure 7.38 pour deux tensions de valeurs absolues de 0,25 et 0,5 (kV), respectivement.

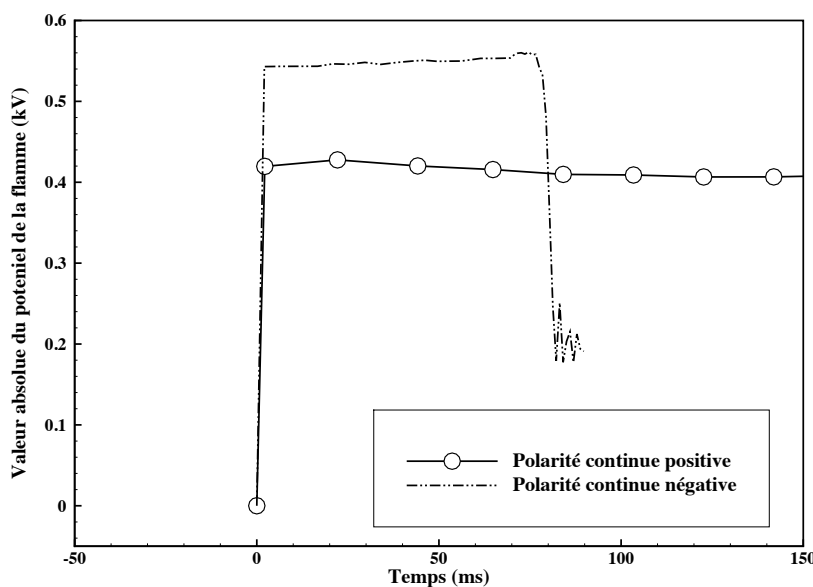
Pour des potentiels électriques appliquées de valeurs absolues identiques, l'intensité de la tension de la flamme est plus faible dans le cas positif. Cette différence peut être attribuée, comme nous avons vu dans la section 7.4, à la production chimique et à la diffusion électrique des espèces chargées positives et négatives dans la zone de réaction. Étant donné que la base de la flamme se comporte comme une électrode supplémentaire, la chute anodique au voisinage de l'électrode inférieure, dans le cas positif, est alors plus faible que celle cathodique dans le cas négatif. Ceci peut donc expliquer que l'amélioration de la stabilisation est meilleure dans le cas négatif. À forte tension négative, lorsque la flamme arrive dans une zone très proche de l'électrode inférieure, son potentiel chute rapidement à cause de l'augmentation de la distance entre la flamme et l'électrode de haute tension (voir analyse dans la section 7.4).

À l'opposé des résultats du présent travail, Criner [115] observe une stabilisation légèrement meilleure avec la tension positive pour la flamme de méthane. En effet, dans notre modèle, la

7.6 Influence de la polarité



-| V_0 |= 250 Volts-



-| V_0 |= 500 Volts-

Figure 7.38 – Évolution temporelle du potentiel de la flamme en polarité continue pour différentes tensions.

mobilité électrique est prise la même pour tous les ions, à la fois positifs et négatifs, retenus dans le mécanisme réactionnel. Cette mobilité électrique caractérise l'amplitude des déplacements des espèces chargées, et par conséquent l'intensité de la force électrique engendrée. Ceci peut donc expliquer cette différence des résultats, concernant la polarité produisant la meilleure

amélioration de la stabilité, entre les deux études.

Comparaison tension continue / tension alternative

Comme vu dans la section 7.5, la diminution de la hauteur de suspension en polarité alternative dépend de la fréquence de la tension électrique appliquée. Donc pour pouvoir comparer le cas continu avec le cas alternatif, il faut prendre en compte la fréquence de la tension alternative. Par exemple pour une tension de 0,5 (kV), la stabilité est meilleure avec la tension alternative lorsque la fréquence est élevée (10 kHz), tandis que l'effet inverse est observé quand la fréquence utilisée est abaissée (0,1 kHz).

7.7 Dynamique de l'écoulement à la base de la flamme

De nombreuses études expérimentales et numériques [9, 22, 26, 196, 197] ont mis en évidence le rôle du caractère propagatif de la pointe de flamme partiellement prémélangée pour étudier le mécanisme de stabilisation des flammes de diffusion décrochées. En effet, le point triple de la flamme liftée se stabilise dans une région, où le mélange est stœchiométrique et la vitesse de l'écoulement est de l'ordre de la vitesse de propagation de la flamme laminaire prémélangée à la stœchiométrie.

Sur les figures 7.6 et 7.10, on peut observer que la structure globale de la flamme n'est pas modifiée par l'application du potentiel électrique, mais que la flamme est simplement translatée vers le bas. Ainsi, sur la figure 7.10, on observe que la distribution du terme source devient plus étroite lorsque la flamme se stabilise près du brûleur : la branche pauvre de la flamme triple tend à disparaître. Ceci peut être expliqué par le fait que les gradients du mélange sont plus forts en résultat du rapprochement de la flamme de l'injecteur.

Pour comprendre les mécanismes conduisant à la propagation de la flamme vers l'injecteur après l'application du champ électrique, une analyse détaillée de la dynamique de l'écoulement à la base de flamme, en présence d'une tension appliquée, a été effectuée. Dans ce contexte, la réponse de la composante axiale de la vitesse d'écoulement, U_x , et de la vitesse d'écoulement projetée sur la normale au front de flamme, U_n , a été étudiée. Ces vitesses sont extraites à la base de flamme sur la ligne stœchiométrique à un endroit où la fraction massique de la variable d'avancement est égale à 0,005 (la figure 7.7 permet d'observer l'intersection de ces deux iso-lignes où les vitesses sont enregistrées).

La figure 7.39 illustre la variation des vitesses U_x et U_n avec la tension appliquée quand la base de la flamme atteint sa position de stabilisation. Pour les valeurs du potentiel appliqué

7.7 Dynamique de l'écoulement à la base de la flamme

($< +0,75$ kV en polarité continue positive par exemple) menant à la stabilisation de la flamme dans une région relativement loin de l'injecteur (> 3 mm), la vitesse projetée sur la normale au front de flamme est très proche de la vitesse de propagation de la flamme monodimensionnelle de prémélange brûlant à la stoechiométrie ($S_L^0=0,38$ m/s). Cependant, pour les tensions accrues qui permettent la stabilisation de la flamme dans une zone proche de l'injection des gaz, la vitesse projetée sur la normale au front de flamme est diminuée en comparaison avec S_L^0 . Ceci pourrait être lié au fait que la pointe de flamme, dans ce cas, se stabilise dans une région de très forts gradients de mélange. En effet, la plupart des auteurs [26, 31] ont conclu que la vitesse de propagation de la flamme partiellement prémélangée décroît en augmentant le gradient de la fraction de mélange. Par conséquent, et puisque le phénomène de stabilisation est attribué à un mécanisme d'équilibre entre la vitesse de propagation et la vitesse locale de l'écoulement, il est normal que la vitesse à la position où se stabilise la flamme, lorsque les gradients du mélange sont forts, soit inférieure à celle lorsque la flamme est stabilisée dans une région où les gradients du mélange sont relativement faibles. Effectivement, on voit sur la figure 7.10 (cas de 1 kV) que l'orientation de la flamme est modifiée quand elle est proche de l'injecteur, et que sa pointe se

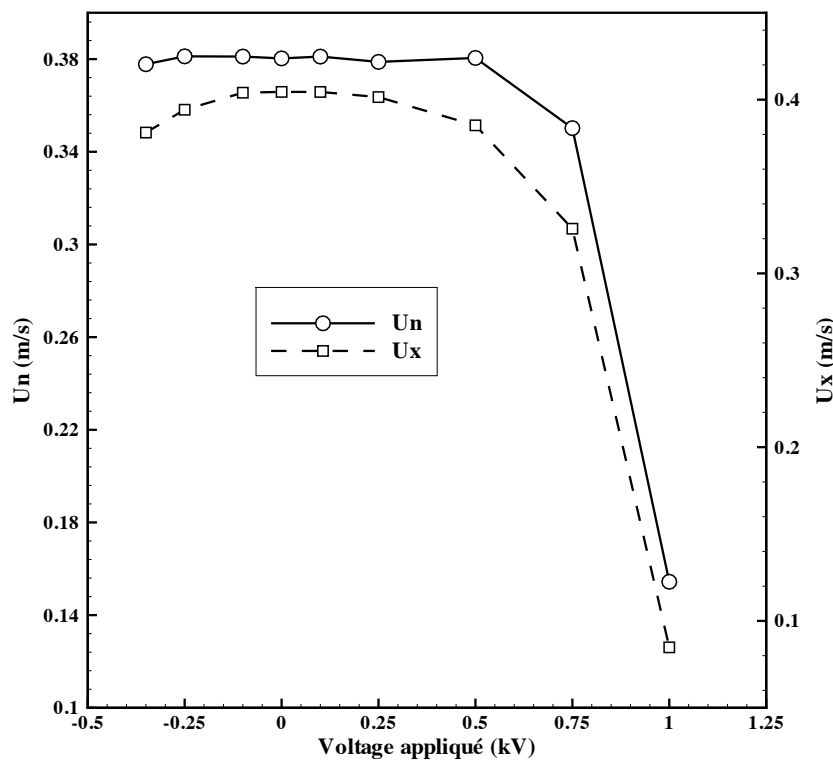


Figure 7.39 – Variation de la vitesse axiale (U_x) et de la vitesse projetée sur la normale au front de flamme (U_n), extraites à la base de flamme, avec la tension appliquée en polarité continue, lorsque la flamme atteint sa position de stabilisation.

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

stabilise dans une région légèrement riche en carburant, à cause des forts gradients de mélange dans ces endroits.

Quelque soit la valeur de la tension appliquée, la composante axiale de la vitesse est de même ordre que la vitesse normale au front de flamme. Toutefois, la différence entre les deux vitesses devient de plus en plus prononcée avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique. Ceci est attendu compte tenu de la modification de l'orientation de la flamme avec le rapprochement du plan d'injection.

Ces mêmes vitesses : axiale et projetée sur la normale au front de flamme, extraites juste en amont de la base de flamme, ont été enregistrées lors de la propagation de flamme après l'application d'une tension continue positive de +0,5 (kV). L'évolution temporelle de la figure 7.40 (côté droit) montre une forte diminution de la vitesse normale au front, juste après l'application du champ électrique. Mais après un certain temps, cette vitesse augmente à nouveau jusqu'à ce qu'elle se stabilise à une valeur d'environ 0,38 (m/s), quand la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation. En effet, en présence du champ électrique extérieur, les ions quittent le front de flamme et échangent leurs quantité de mouvement avec le flux des réactifs; ceci permet de ralentir la vitesse de l'écoulement en amont du point triple, qui devient inférieure à la vitesse de la flamme stœchiométrique laminaire (S_L^0). La flamme trouve alors des conditions

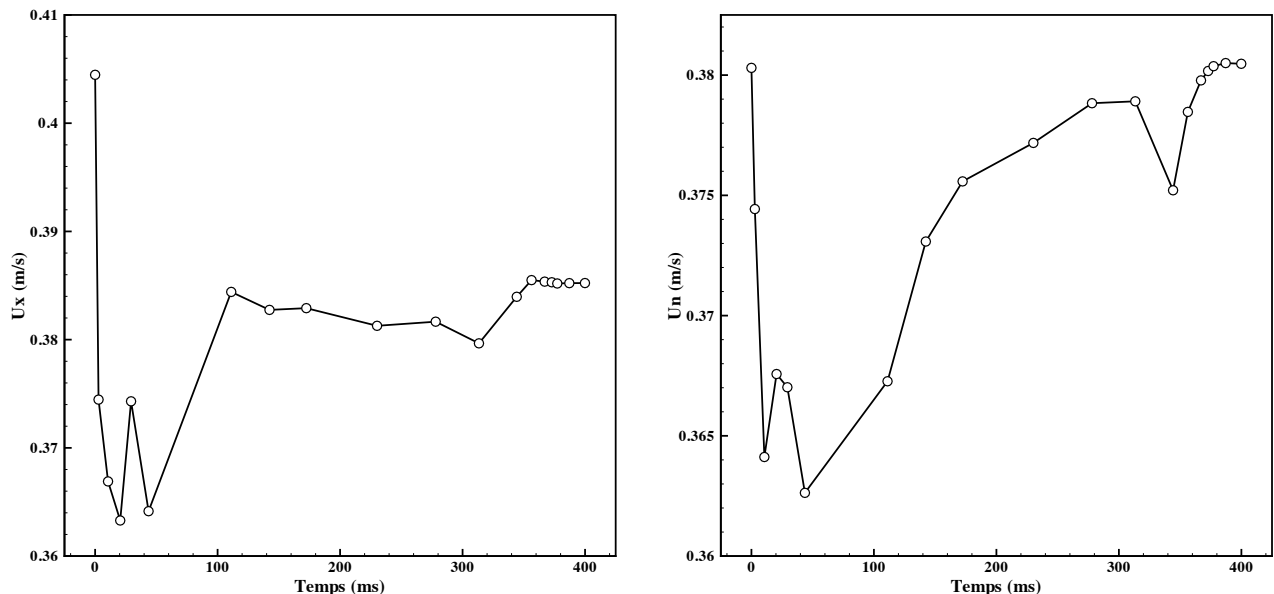


Figure 7.40 – Évolution temporelle de la vitesse axiale U_x (gauche), et de la vitesse projetée sur la normale au front de flamme U_n (droite), extraites à la base de flamme, pour une tension continue positive de +0,5 (kV).

7.7 Dynamique de l'écoulement à la base de la flamme

dynamiques favorables pour se propager dans la direction opposée des gaz venant de l'injecteur. Simultanément, de nouveaux ions sont continuellement produits par la combustion et se sont déplacés vers l'électrode située au plan de l'injection, permettant ainsi la propagation de la flamme de plus en plus vers l'injecteur. En résultat de cette propagation, la vitesse rencontrée par les cations ou les anions, proche de la ligne stœchiométrique, est de plus en plus élevée. L'effet du vent ionique devient alors insuffisant pour ralentir la vitesse du fluide en dessous de la vitesse laminaire monodimensionnelle (S_L^0), et une position d'équilibre est atteinte. L'évolution temporelle de la vitesse axiale (cf. figure 7.40 côté gauche) confirme les observations précédentes.

Pour mettre plus en évidence l'impact des forces électriques sur le champ dynamique de l'écoulement en amont de la flamme, les vitesses avant et après l'application du champ électrique, lorsque la vitesse d'air est augmentée (flamme qui est soufflée, voir section 7.2.2), sont comparées à une certaine position axiale donnée. Tout d'abord, la vitesse de l'écoulement en amont de la flamme se soufflant, u_p , est enregistrée lorsque la valeur maximale du terme source

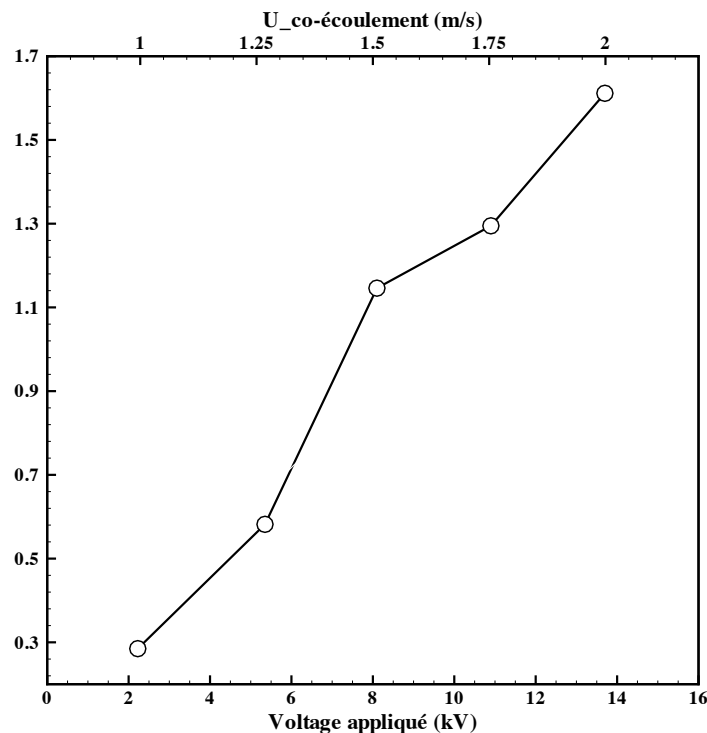


Figure 7.41 – Variation de la différence ($u_p - u_d$) entre les vitesses, extraites à la base de flamme AVEC (u_d) et SANS (u_p) champ électrique à une même hauteur de flamme (4,9 fois de diamètre de l'injecteur), en fonction de la vitesse de l'écoulement coaxial. Ici, la valeur du potentiel correspond à la valeur minimale à appliquer afin d'arrêter le soufflage de la flamme pour une vitesse d'air et une hauteur données (voir section 7.2.2).

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

de dégagement de la chaleur atteint une position axiale égale à 4,9 fois le diamètre d'injection du carburant (2 mm). Ensuite, et à la même position axiale, la vitesse de l'écoulement (u_d), lorsque la flamme progresse à nouveau dans le sens opposée des gaz frais sous l'influence de la tension appliquée, est également enregistrée. Pour chaque valeur du potentiel stoppant la procédure du soufflage (voir figure 7.15), la différence entre les valeurs des deux vitesses, $u_p - u_d$, est tracée sur la figure 7.41. Comme u_p et u_d sont extraites à la base de flamme pour une position axiale identique, leur différence donne donc une estimation de l'effet du vent ionique sur le champ de vitesse (l'impact possible du changement de la position radiale est négligé). La différence entre les deux vitesses dépend essentiellement du potentiel appliqué avec une relation pratiquement linéaire. Le changement de la vitesse, avant et après l'application du champ électrique, va jusqu'à 1,6 (m/s) pour $V_0 = 13,7$ (kV), ce qui montre l'effet important du vent ionique sur le ralentissement de l'écoulement.

Pour mieux comprendre le caractère oscillatoire de la flamme observé lorsqu'elle atteint sa position de stabilisation en polarité alternative, nous avons tracé l'évolution temporelle de la vitesse de l'écoulement normale au front de flamme, U_n , extraite en amont du point triple. Cette évolution est montrée sur la figure 7.42. Pareillement à la hauteur de suspension, la vitesse à la base de flamme change périodiquement avec une fréquence synchronisée avec la fréquence

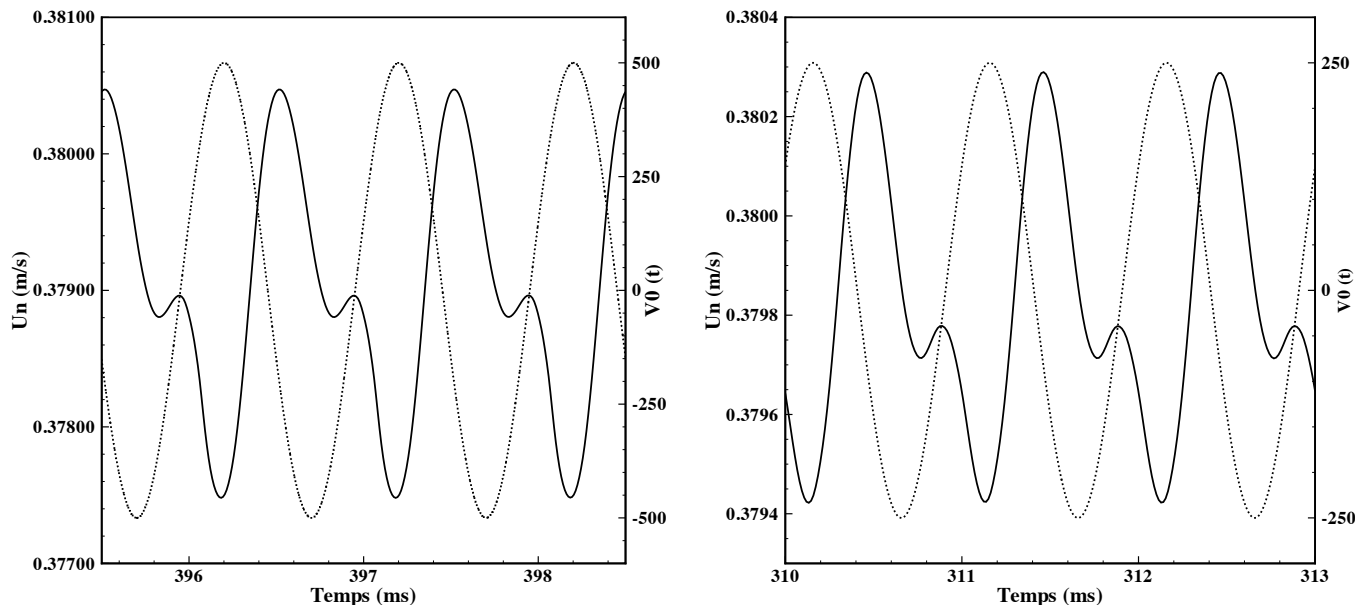


Figure 7.42 – Évolution temporelle de la vitesse de l'écoulement projetée sur la normale au front (U_n) (ligne continue), et du voltage appliqué (ligne pointillée), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz). (gauche) : $V_0 = \pm 0,5$ (kV), (droite) : $V_0 = \pm 0,25$ (kV).

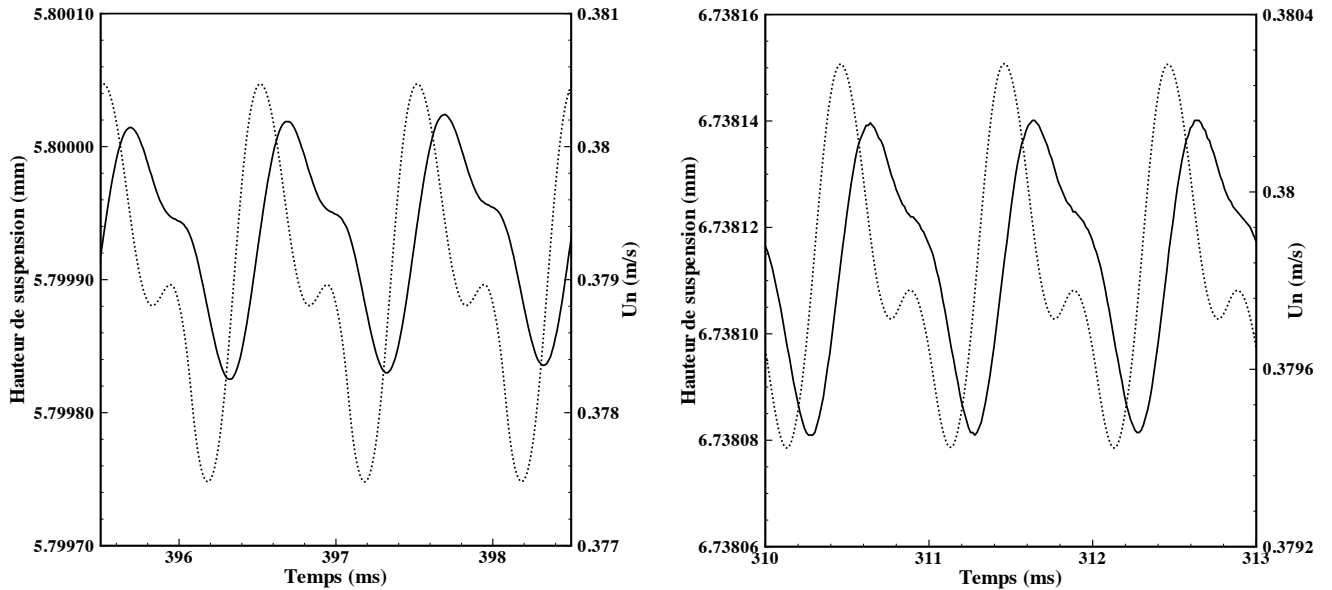


Figure 7.43 – Comparaison de l'évolution temporelle de la vitesse de l'écoulement projetée à la normale du front (U_n) (ligne pointillée), avec celle de la hauteur d'accrochage (ligne continue), lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation en polarité alternative avec une fréquence de 1 (kHz). (gauche) : $V_0 = \pm 0,5$ (kV), (droite) : $V_0 = \pm 0,250$ (kV).

appliquée. Cette variation est très faible comparée à la vitesse de l'écoulement, par exemple elle est de l'ordre de $8,7 \times 10^{-4}$ (m/s) pour $V_0 = \pm 0,25$ (kV) et d'environ 3×10^{-3} (m/s) pour $V_0 = \pm 0,5$ (kV). La vitesse U_n reste également très proche de la vitesse de propagation de la flamme laminaire à la stœchiométrie ($S_L^0 = 0,38$ m/s). En comparant cette évolution avec celle de la hauteur de suspension (voir figure 7.43), on voit, d'une manière globale, que la position de la flamme suit la vitesse de l'écoulement avec un léger déphasage. Ce déphasage correspond au temps de réponse de la hauteur de stabilisation au changement de vitesse qui la précède.

Globalement, la présente analyse de la dynamique de l'écoulement, en amont de la base de flamme, est cohérente avec les résultats de Lee et Chung [9], qui ont attribué le phénomène de stabilisation de la flamme décrochée à un mécanisme d'équilibre entre la vitesse de l'écoulement et la vitesse de propagation de la flamme.

7.8 Effet des anions

Dans la littérature, seules quelques études ont proposé des modèles physique et numérique pour décrire le comportement de la flamme en présence du champ électrique [74, 75, 77, 93]. Dans toutes ces études numériques, les ions négatifs sont négligés et seuls les électrons sont considérés pour représenter la charge négative. Néanmoins, nous avons conclu dans le chapitre

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

précédent (chap.6) que la contribution des anions dans la composition ionique des flammes est considérable, et qu'il est donc important de les inclure dans les modèles décrivant l'interaction du champ électrique avec la flamme. Le but de cette section est alors de vérifier cette dernière conclusion.

Dans ce contexte, des simulations de l'effet de champ électrique sur la stabilisation de flamme en ne considérant que les ions positifs et les électrons, c'est-à-dire en ne modélisant que la partie du modèle s'intéressant aux ions positifs (cf. section 5.3.3.1) schématisée sur la figure 5.2, sont réalisées et confrontés aux résultats des simulations tenant compte des ions négatifs. La figure 7.44 présente la variation de la hauteur de suspension divisée par la hauteur de suspension de référence en fonction de la tension appliquée pour les deux approches : sans et avec transport des anions, respectivement. On rappelle que la hauteur de suspension de référence correspond à la hauteur d'accrochage de la flamme calculée avec une vitesse d'air égale à 0,8 (m/s) et sans champ électrique externe. En comparant les deux évolutions, on observe globalement une meilleure amélioration de la stabilisation avec le modèle qui tient compte des anions, particulièrement en polarité négative.

Pour comprendre cette différence, nous avons comparé, sur la figure 7.45, les champs de concentration totale des ions positifs obtenus avant l'application du champ électrique pour les

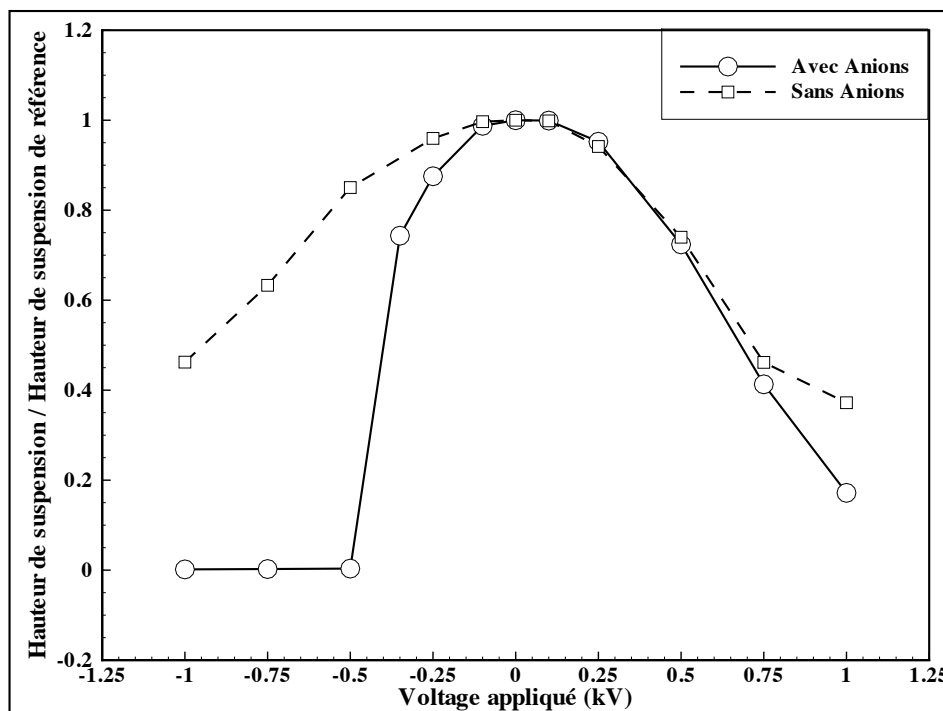


Figure 7.44 – Évolution de la hauteur de suspension de la flamme avec le voltage appliqué en polarité continue. (ligne continue) : en tenant compte des anions, et (ligne pointillée) : en négligeant les anions.

deux approches. De cette figure, il est clair que la concentration des cations, dans les zones situées sur les deux cotés de la pointe de flamme (branches riche et pauvre), est plus élevée dans le cas modélisant les anions. Ce résultat est confirmé par la courbe 7.46, qui présente l'évolution spatiale de la concentration totale positive à la base de flamme pour les deux approches. Dans ces zones, la recombinaison domine le processus chimique des cations. Cette différence de concentration peut être donc attribuée à la différence des taux de recombinaison des cations avec les électrons dans les deux approches (voir section 6.3). En effet, lorsque les anions sont transportés, la concentration des électrons, notamment en amont de la pointe de flamme, diminue en résultat de la participation de ces derniers dans le processus de production des anions. En conséquence, la recombinaison des cations est moins forte et leur concentration est plus importante dans le cas où les ions négatifs sont considérés.

En polarité positive, puisque ce sont les cations qui se déplacent en amont de la flamme pour réduire la vitesse de l'écoulement, il est donc logique que la répartition de la force électrique

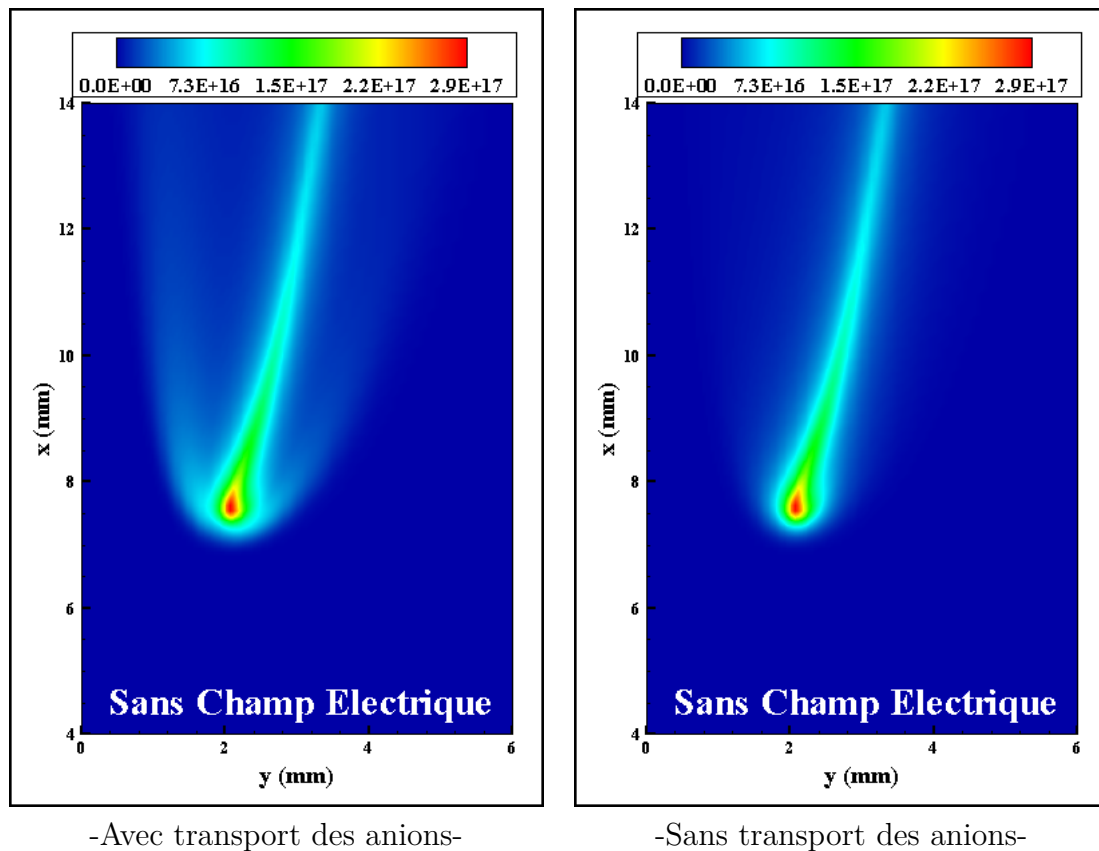


Figure 7.45 – Distribution des cations (Par/m^3) dans la flamme avant l'application du champ électrique. (gauche) : en prenant compte des anions, et (droite) : en négligeant les anions.

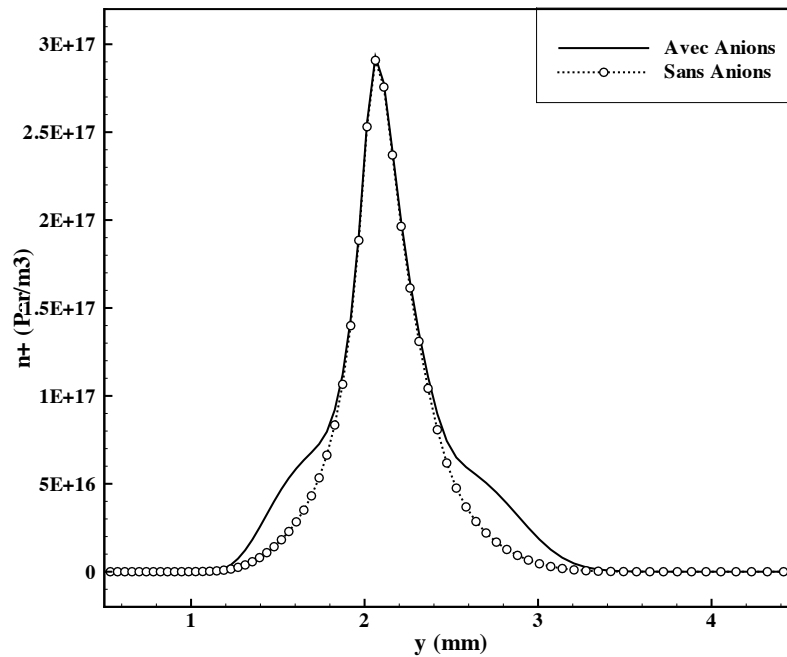


Figure 7.46 – Profils des ions positifs, extraits à la base de flamme à l'endroit où le dégagement de la chaleur est maximal, avant l'application du champ électrique.

autour de la pointe de flamme soit plus étendue dans le cas de l'approche considérant les anions (voir figure 7.47). Ceci peut alors expliquer que la meilleure stabilisation, dans le cas continu positif, est généralement obtenue lorsque les anions sont transportés.

Lorsque la polarité appliquée est négative, les écarts entre les deux approches, concernant les hauteurs d'accrochage, sont significatifs. Ceci est attendu étant donné que ce sont principalement les anions, dans ce cas, qui transfèrent leur quantité de mouvement aux molécules neutres venant de l'injecteur, pour réduire la vitesse de l'écoulement principal. En effet, en vue de leur forte mobilité électrique, les électrons disparaissent rapidement de l'amont de la base de flamme. Ceci signifie que leur fréquence de collision¹ avec les neutres pour transférer la quantité de mouvement est très faible. Cet effet peut être vérifié simplement en examinant l'équation 3.3.24 qui montre que la fréquence de collision est inversement proportionnelle à la mobilité. En conséquence, la quantité de mouvement que les électrons échangent avec les autres espèces dans cette zone est relativement faible (voir figure 7.48 côté droit), un fait qui explique leur effet mineur sur la vitesse de l'écoulement.

1. On rappelle que la fréquence de collision est le nombre moyen de collisions entre les molécules par unité de temps.

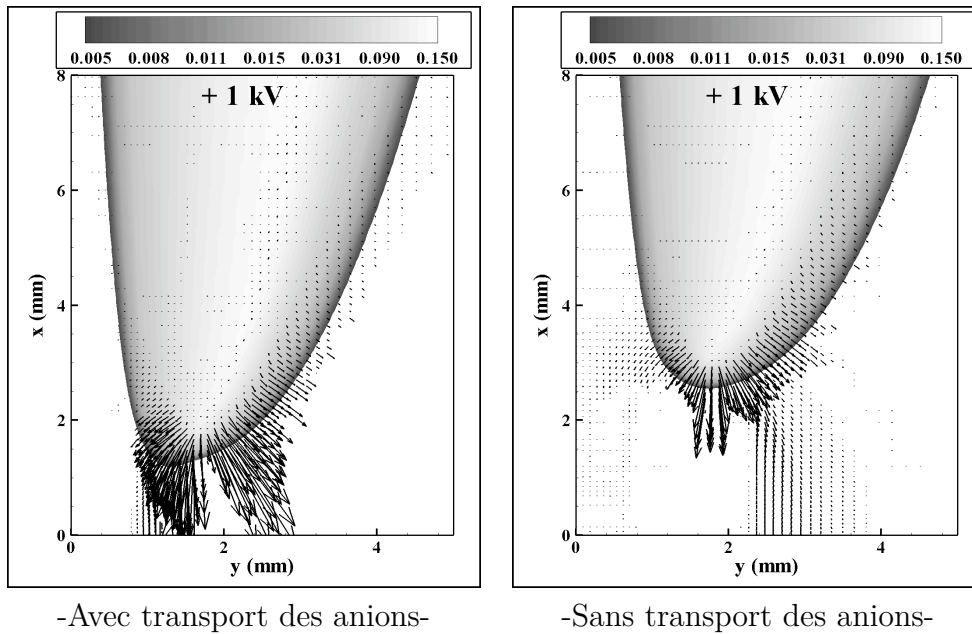


Figure 7.47 – Champ de vecteurs force électrique en amont de la base de flamme pour une tension positive de $V_0 = +1$ kV, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation. (gauche) : en prenant compte des anions, et (droite) : en négligeant les anions.

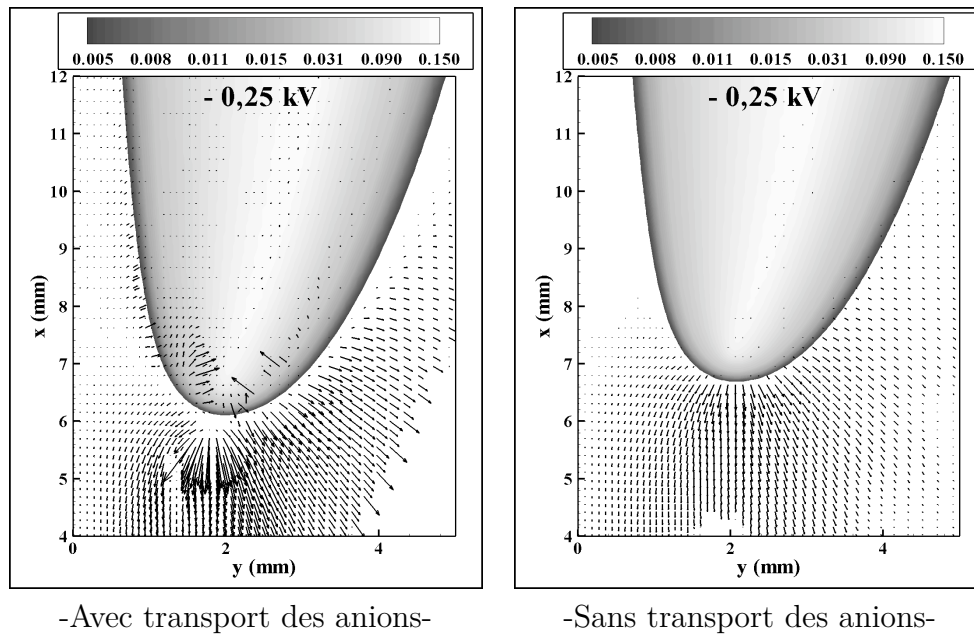


Figure 7.48 – Champ de vecteurs force électrique en amont de la base de flamme pour une tension négative de $V_0 = -0,25$ kV, lorsque la flamme atteint sa nouvelle position de stabilisation. (gauche) : en prenant compte des anions, et (droite) : en négligeant les anions.

7.9 Effet du choix de la mobilité électrique

Dans toutes les simulations présentées jusqu'à maintenant, la mobilité électrique de tous les ions retenus dans le modèle chimique est prise égale à $1 \left(\frac{cm^2}{V \cdot s}\right)$. Cette valeur est habituellement utilisée pour quantifier la mobilité des ions dans les flammes [4, 8], mais elle reste une valeur très moyenne puisque la mobilité varie normalement avec l'intensité électrique, la température et la composition du mélange gazeux. Cependant, d'un autre côté, il n'existe pas encore dans la littérature des expressions formelles décrivant la variation de la mobilité ionique dans les flammes en fonction des différents paramètres qui l'influencent.

Afin d'étudier la sensibilité de la hauteur de stabilisation au choix de la valeur de la mobilité ionique, deux autres valeurs constantes citées dans la littérature sont testées, respectivement, 0,8 [165] et 2,8 $\left(\frac{cm^2}{V \cdot s}\right)$ [171]. Cette analyse est réalisée pour les trois types de polarité en fixant la tension appliquée à une certaine valeur cible. Les résultats obtenus sont exposés dans le tableau 7.3, qui montre l'évolution de la hauteur d'accrochage de la flamme en fonction de la mobilité utilisée. En comparant ces valeurs, il est clair que la hauteur de stabilisation est très peu sensible au changement des valeurs de mobilité testées ici. Pour les trois types de polarités, la stabilité est légèrement meilleure d'autant que la mobilité choisie est élevée.

Mobilité des ions $\left(\frac{cm^2}{V \cdot s}\right)$	Hauteur de stabilisation Hauteur de stabilisation de référence		
	Tension continue positive $V_0 = +0,5$ (kV)	Tension continue négative $V_0 = -0,25$ (kV)	Tension alternative $V_0 = \pm 0,5$ (kV), $f = 1\text{kHz}$
0,8	0,729	0,884	0,842
1,0	0,724	0,875	0,818
2,8	0,696	0,861	0,812

Tableau 7.3 – Hauteur de suspension de la flamme pour différentes valeurs de mobilité électrique des ions.

En effet, l'accroissement de la mobilité électrique augmente l'aptitude de l'espèce chargée à se déplacer en réponse au champ électrique. Donc, pour une même tension appliquée, plus la mobilité est grande et plus la quantité d'ions déplacés vers l'électrode inférieure est importante. Néanmoins, lorsque la valeur de la mobilité est augmentée, ces ions disparaissent également de l'amont de la base de flamme plus rapidement. La quantité d'ions devant la pointe de flamme est alors un compromis entre les deux effets précédents. On peut conclure donc que les valeurs de mobilité ionique testées dans cette étude varient dans un intervalle, où les deux effets font

7.9 Effet du choix de la mobilité électrique

de sorte que la quantité d'ions positifs ou négatifs en amont de la base de flamme augmente très faiblement avec l'accroissement de la mobilité.

Ce dernier résultat semble contredire la conclusion faite à la fin de la section précédente (7.8), où il a été conclu que les électrons, malgré leur grande mobilité électrique, ont un effet mineur sur la vitesse de l'écoulement. Cependant, cette contradiction n'est en effet qu'apparente, puisque les électrons ont une mobilité très importante en comparaison avec celles des ions testées ici ; par conséquent, ils sont peu présents à l'amont de la base de flamme. Ceci est lié au fait que chaque électron a une fréquence de collision permettant d'échanger la quantité de mouvement très faible en comparaison de celle que chaque ion peut échanger (voir [eq.3.3.24](#)) ; et c'est pour cette raison que la force électrique devient faible lorsque seuls les électrons sont considérés pour représenter la charge négative de la flamme (voir [figure 7.48](#) côté droit).

Chapitre 7. Simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité de flamme

$U_{air}=0,8 \text{ (m/s) et } \kappa = 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$							
Tension V_0 (kV)	Polarité positive		Polarité négative		Polarité alternative (avec anions)		
	Sans anions	Avec anions	Sans anions	Avec Anions	f=0,1 (kHz)	f=1 (kHz)	f=10 (kHz)
0,1	×	×	×	×			
0,25	×	×	×	×		×	
0,35				×		×	
0,45				×			
0,5	×	×	×	×	×	×	×
0,75	×	×	×	×		×	
1	×	×	×	×			
1,25		×					
$U_{air}=0,8 \text{ (m/s) et } \kappa = 0,8 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$							
0,25				×			
0,5		×				×	
$U_{air}=0,8 \text{ (m/s) et } \kappa = 2,8 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$							
0,25				×			
0,5		×				×	
$U_{air}=1, 1,25, 1,5, 1,75, 2 \text{ (m/s) et } \kappa = 1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$							
2,225		×					
5,350		×					
8,100		×					
10,90		×					
13,70		×					

Ces simulations 2D sont des calculs parallèles MPI réalisés sur un nombre de processeurs de 128 en moyenne sur la grappe de calcul : ANTARES du CRIHAN d'une solution IBM iDataPlex (<http://www.crihan.fr/>). Elles sont très coûteuses en temps de calcul (en moyenne 200 heures × 128 procs) comparées aux calculs classiques (flamme sans champ électrique), à causes des facteurs supplémentaires suivants :

- 5 espèces chargées transportées.
- 23 espèces neutres interpolées pour le calcul des taux des réactions ioniques.
- 40 réactions ioniques décrites par loi D'Arrhenius.
- Calcul des propriétés thermodynamiques de 28 espèces afin de calculer les taux de réaction inverses.
- Résolution d'une équation de Poisson pour le potentiel électrique.
- Pas de temps diminué lorsque le champ électrique est appliqué, à cause de la diffusion électrique des espèces chargées.

Tableau 7.4 – Tableau récapitulatif des simulations 2D réalisées.

Conclusion générale et perspectives

La présente étude s'inscrit dans l'axe des nouveaux concepts développés pour améliorer les rendements énergétique et écologique de la combustion. Elle s'intéresse en particulier à l'amélioration de la stabilité des flammes de diffusion par l'utilisation de l'interaction de champ électrique avec les ions produits naturellement par la combustion.

Dans différents travaux de la littérature, les champs électriques apparaissent comme une solution prometteuse pour assister la combustion et en particulier la stabilisation des flammes. Néanmoins, il est difficile de conclure sur les propriétés des champs électriques utiles à l'amélioration de la combustion, du fait de la disparité des résultats. Par conséquent, ce nouveau procédé très complexe nécessite des études, à la fois, expérimentales et numériques poussées. À ce titre, un modèle mathématique permettant de modéliser la combustion en présence d'un champ électrique a été développé dans la présente thèse. Les équations de l'aérothermochimie sont couplées à des équations de bilan pour les densités des ions (positifs et négatifs) et des électrons et une équation de Poisson pour le potentiel électrique est résolue. Ce modèle n'incorpore pas les effets possibles du champ électrique sur la chimie de la combustion et contient seulement les effets du vent ionique. La combustion des substances neutres a été décrite par une chimie tabulée détaillée de la fraction de mélange et la variable d'avancement. Cette chimie a été couplée avec un mécanisme simplifié comprenant 40 réactions ioniques et 28 substances chimiques, dont 5 chargées, pour décrire le processus chimique des espèces chargées. Une partie de ces réactions ioniques se produisent d'une manière très rapide et imposent un temps caractéristique très faible, qui rend la simulation quasiment impossible. Dans cette optique, une méthode de linéarisation des équations de transport des espèces chargées est proposée dans cette étude. Cette technique a montré son efficacité en terme de gain en temps de calcul en comparaison avec la méthode classique explicite.

Le mécanisme réactionnel développé dans ce travail pour prédire numériquement la répartition des espèces chargées dans les flammes a été évalué en comparant avec deux études

expérimentales dans lesquelles les mesures de concentrations d'espèces chargées existent. Il a été conclu que les résultats obtenus sont raisonnablement acceptables. Les simulations ont également montré que la contribution des anions (souvent négligés) dans les compositions ioniques des flammes est loin d'être négligeable.

Les principaux objectifs de cette étude étaient de vérifier la capacité du phénomène du vent ionique à influencer la stabilisation de la flamme, et de fournir un outil numérique permettant de prédire le comportement de la flamme sous l'effet d'un champ électrique externe. Pour atteindre ces objectifs, le comportement d'une flamme de diffusion méthane/air laminaire, soumise à un champ électrique généré entre deux électrodes, a été analysé. Une telle configuration simplifiée d'une flamme laminaire permet d'utiliser un maillage assez raffiné pour capturer avec précision les variations de vitesse induites par le champ électrique. Des simulations qui considèrent, pour la première fois à notre connaissance, les ions négatifs et qui examinent les trois types de tension y compris la polarité alternative sont réalisées. La réponse de la hauteur de stabilisation de la flamme à la tension électrique appliquée a été étudiée, et la modification du champ dynamique en amont de la base de flamme induite par le champ électrique externe a été mise en évidence.

L'analyse des résultats obtenus par les différentes simulations montre que la présence du champ électrique améliore la stabilisation de la flamme quelque soit la polarité appliquée. L'ampleur de cette amélioration dépend essentiellement de l'intensité et de la polarité de la tension appliquée. Si la tension appliquée est alternative, un facteur supplémentaire s'ajoute pour influencer la stabilisation de la flamme : c'est la fréquence de courant électrique. Les ions négatifs devront également être pris en compte dans le modèle, en particulier quand le potentiel appliqué est de polarité négative (dans notre configuration) ou alternative.

Le présent modèle mathématique a permis de reproduire qualitativement des observations expérimentales faites par d'autres auteurs dans des configurations similaires. Puisque les effets chimiques des espèces chargées sur les espèces neutres ne sont pas considérés dans ce modèle, qui contient seulement l'effet du vent ionique, on peut conclure que le vent ionique à lui seul permet d'améliorer la stabilité de la flamme.

D'autres développements du modèle peuvent être envisagés. Par exemple, introduire une cinétique chimique détaillée prenant en compte directement le couplage des espèces chargées avec les espèces neutres. Ce développement pourrait déterminer jusqu'à quel point l'hypothèse de tabulation par des flammes prémélangées est valable pour déterminer les concentrations ioniques et étudier l'interaction avec les champs électriques. Il permettrait, d'un autre côté, de vérifier la capacité de la méthode numérique de linéarisation des équations de transport des espèces, développée et utilisée dans ce travail, à traiter la raideur de ces schémas cinétiques. Un niveau supplémentaire de complexité est également envisageable en transportant les équations

de quantité de mouvement des espèces chargées réparties en trois familles : les cations, les anions et les électrons. Ces deux dernières approches pourraient déterminer dans quelle mesure les effets observés expérimentalement peuvent être attribués au vent ionique plutôt qu'à des effets de cinétique chimique. Par ailleurs, les expressions de mobilité peuvent avoir un impact important sur la réponse de la flamme au champ électrique. La supposition de la valeur constante, utilisée dans le présent travail, peut être certainement discutée ; et l'utilisation des relations considérant l'évolution avec l'intensité du champ électrique, la composition du mélange et la température serait éventuellement une amélioration. D'un point de vue quantitatif, il serait aussi très intéressant de simuler une configuration expérimentale existante telle que celle du travail de thèse de Criner [115] ou celle des articles de Chung et ses coauteurs [10, 154, 159–161]. Des méthodes numériques utilisant des techniques de raffinement local devront alors être employées, afin de limiter le temps de calcul [198].

Références bibliographiques

- [1] W.T. BRANDE. *The bakerian lecture : On some new electro-chemical phenomena.* Phil. Trans. R. Soc. **104**, 51–61 (1814). 4, 36, 73
- [2] S.M. STARIKOVSKAIA. *Plasma assisted ignition and combustion.* J. Phys. D : Appl. Phys. **39**, 265–299 (2006). 5, 49, 68
- [3] [HTTP ://WWW.ONERA.FR/COUPDEZOOM/40-PLASMA-COMBUSTION.PHP](http://www.onera.fr/COUPDEZOOM/40-PLASMA-COMBUSTION.PHP). *Le plasma en renfort de la combustion.* xi, 5
- [4] A.B. FIALKOV. *Investigations on ions in flames.* Prog. Energy Combust. Sci. **23**, 399–528 (1997). 6, 36, 37, 38, 67, 73, 74, 88, 143, 178
- [5] R. MCADAMS. *Prospects for non-thermal atmospheric plasmas for pollution abatement.* Journal of Physics D : Applied Physics **34**, 2810–2821 (2001). 6
- [6] L. CADEMARTIRI. *Taming the flame : Electrical wave blaster could provide new way to extinguish fires.* The 241st National Meeting and Exposition of the American Chemical Society (ACS). (March 27-31, 2011, Anaheim, CA). xi, 6, 43
- [7] MATVEEV, S. MATVEEVA, AND E. KIRCHUK. *Plasma assisted combustion technologies.* Applied Plasma Technologies, USA. 7
- [8] J. LAWTON AND F.J. WEINBERG. *Electrical aspects of combustion.* Clarendon Press, Oxford (1969). 8, 38, 40, 42, 67, 73, 88, 178
- [9] J. LEE AND S.H. CHUNG. *Characteristics of reattachment and blowout of laminar lifted flames in partially premixed propane jets under normal and micro gravity conditions.* Combust. Flame **127**, 2194–2204 (2001). 8, 20, 21, 168, 173
- [10] S.M. LEE, C.S. PARK, M.S. CHA, AND S.H. CHUNG. *Effect of electric fields on the liftoff of nonpremixed turbulent jet flames.* IEEE Trans. Plasma Sci. **33**, 1703–1709 (2005). xi, 8, 75, 78, 81, 183

Références bibliographiques

- [11] M. BELHI, P. DOMINGO, AND P. VEVERSCH. *Direct numerical simulation of the effect of an electric field on flame stability*. *Combust. Flame* **157**, 2286–2297 (2010). 9, 104
- [12] B. LEWIS AND G. VON ELBE. *Combustion, Flames and Explosions of Gases, Third Edition*. Hardcover, Academic Press (1987). 12
- [13] R. BORGHI. *La combustion et les flammes*. Technip (1995). 12, 13
- [14] S. TURNS. *Introduction to Combustion*. McGraw Hill Higher Education (2000). 12
- [15] [HTTP://WWW.RITIMO.ORG/DOSSIERS_THEMATIQUES/ENERGIE/ENERGIE_EPUISEMENT.HTML](http://www.ritimo.org/DOSSIERS_THEMATIQUES/ENERGIE/ENERGIE_EPUISEMENT.HTML). *Enjeux pour un développement durable ; epuisement des ressources fossiles*. Ritimo, Cdtm34 (2008). 13
- [16] G. GODEL. *Modélisation de sous-maille de la combustion turbulente. Développement d'outils pour la prédiction de la pollution dans une chambre aéronautique*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France (2010). 14, 35
- [17] A. NAUDIN. *Simulation des grandes échelles de la combustion turbulente avec chimie détaillée tabulée*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France (2008). 14, 31, 35
- [18] D. VEYNANTE. *Flamme de diffusion laminaire*. Techniques de l'ingénieur **BE8320** (1999). 15
- [19] I. GLASSMAN. *Combustion, 2nd edition*. Orlando Academic Press (1987). 17
- [20] C. LACOUR. *Stabilité de flammes laminaires partiellement prémélangées - Application aux brûleurs domestiques*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France (2006). xi, 18, 19, 21
- [21] G.T. KALGHATGI. *Lift-off heights and visible lengths of vertical turbulent jet diffusion flames in still air*. *Combust. Sci. and Tech.* **41**, 17–29 (1984). 18
- [22] L. MUNIZ AND M. G. MUNGAL. *Instantaneous flame-stabilization velocities in lifted-jet diffusion flames*. *Combust. Flame* **111**, 16–30 (1997). 20, 168
- [23] K.M. LYONS AND K.A. WATSON. *Partially premixed combustion in lifted turbulent jets*. *Combust. Sci. and Tech.* **156**, 97–105 (2000). 20
- [24] T. PLESSING, P. TERHOEVEN, N. PETERS, AND M. S. MANSOUR. *An experimental and numerical study of a laminar triple flame*. *Combust. Flame* **115**, 335–353 (1998). 20, 21
- [25] I.K. PURI, S.K. AGGARWAL, S. RATTI, AND R. AZZONI. *On the similitude between lifted and burner stabilized triple flames : a numerical and experimental investigation*. *Combust. Flame* **124**, 311–325 (2001). 20

- [26] G.R. RUETSCH, L. VERVISCH, AND A. LINÁN. *Effects of heat release on triple flames*. Phys. Fluids **6**, 1447–1454 (1995). xi, 20, 21, 168, 169
- [27] T. ECHEKKI AND J. H. CHEN. *Structure and propagation of methanol-air triple flames*. Combust. Flame **114**, 231–245 (1998). 21
- [28] P. DOMINGO, L. VERVISCH, AND K. N. C. BRAY. *Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion*. Combust. Theory Modelling **6**, 529–551 (2002). 21
- [29] S.H. CHUNG AND B.J. LEE. *Stabilization of lifted tribrachial flames in a laminar non-premixed jet*. Combust. Flame **86**, 62–72 (1991). 21
- [30] X. QIN, C.W. CHOI, A. MUKHOPADHYAY, I.K. PURI, S.K. AGGARWAL, AND V.R. KATTA. *Triple flame propagation and stabilization in a laminar axisymmetric jet*. Combust. Theory and Modelling **8**, 293–314 (2004). 21
- [31] P.N. KIONI, K.N.C. BRAY, D.A. GREENHALGH, AND B. ROGG. *Experimental and numerical studies of a triple flame*. Combust. Flame **116**, 192–206 (1999). 21, 169
- [32] N.I. KIM, J.I. SEO, K.C. OH, AND H.D. SHIN. *Lift off characteristics of triple flame with concentration gradient*. Proc. Combust. Inst. **123**, 367–374 (2005). 21
- [33] J. BOULANGER. *Caractérisation de l’extrémité d’une flamme de diffusion, Analyse asymptotique et simulation numérique directe de la combustion partiellement prémélangée*. Thèse de Doctorat, Université de Rouen, France (2002). 21
- [34] T. POINSOT AND D. VEYNANTE. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards (2005). xiv, 22, 28, 141, 143
- [35] D.R. STULL AND H. PROPHET. *Janaf thermochemical tables, 2nd edition*. NSRDS-NBS, US National Bureau of Standards **37** (1971). 24
- [36] J.B. HEYWOOD. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill, New-York (1988). 24
- [37] A. ERN AND V. GIOVANGIGLI. *Multicomponent Transport Algorithms*. Lecture Notes in Physics Monographs, Series : , M 24 CNRS Editions, Springer-Varlag (1994). 24, 28
- [38] F. M. WHITE. *Viscous Fluid Flow, 2nd ed.* McGraw-Hill (1991). 25
- [39] [HTTP://KINETICS.NIST.GOV/JANAF/](http://kinetics.nist.gov/janaf/). NIST-JANAF Thermochemical Tables. 27
- [40] V. GIOVANGIGLI. *Multicomponent Flow Modeling*. Birkhäuser, Boston (1999). 28
- [41] V. GIOVANGIGLI. *Plane flames with multicomponent transport and complex chemistry*. Math. Mod. Meth. Appl. Sci. **9**, 337–378 (1999). 28
- [42] V. GIOVANGIGLI. *Multicomponent flow modeling*. Science China Mathematics **55**, 285–308 (2012). 28

Références bibliographiques

- [43] L. GASNOTN. *Modélisation de la cinétique chimique de combustion*. Septième école de combustion, Mont Saint Odile, France (2000). [30](#)
- [44] M. FRENKLACH, T. BOWMAN, G. SMITH, AND B. GARDINER. [HTTP://WWW.ME.BERKELEY.EDU/GRI-MECH/](http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/). [xi](#), [31](#), [32](#), [91](#), [92](#), [115](#)
- [45] R. J. KEE NAD, F. M. RUPLEY, J. A. MILLER, M. E. COLTRIN, J. F. GRGAR, E. MEEKS, H. K. MOFFAT, A. E. LUTZ, G. DIXONLEWIS, M. D. SMOOKE, J. WARNATZ, G. H. EVANS, R. S. LARSON, R. E. MITCHELL, L. R. PETZOLD, W. C. REYNOLDS, M. CARACOTSIOS, W. E. STEWART, P. GLARBORG, C. WANG, AND O. ADIGUN. *CHEMKIN Collection, Release 3.6*. Reaction Design, Inc., San Diego, CA (2000). [31](#)
- [46] A.A. KONNOV. *Development and validation of a detailed reaction mechanism for the combustion of small hydrocarbons*. Proc. Combust. Inst. **28**, Abstr. Symp. Pap. p. 317 (2000). [31](#)
- [47] J. SAVRE. *Simulation numérique instationnaire de la combustion turbulente au sein de foyers aérodynamiques et prédiction des émissions polluantes*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France (2010). [31](#)
- [48] O. GICQUEL. *Développement d'une nouvelle méthode de réduction des schémas cinétiques : Application au méthane*. Thèse de Doctorat, Ecole Centrale, Paris, France (1999). [32](#)
- [49] O. GICQUEL, N. DARABIHA, AND D. THÉVENIN. *Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion*. **28**, 1901–1908 (2000). [xi](#), [32](#), [33](#)
- [50] D. BRADLEY, L. K. KWA, A. K. C. LAU, M. MISSAGHI, AND S. B. CHIN. *Laminar flamelet modeling of recirculating premixed methane and propane-air combustion*. Combust. Flame **71**, 109–122 (1988). [32](#)
- [51] U. MAAS AND S.B. POPE. *Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space*. Combust. Flame **88**, 239–264 (1992). [32](#)
- [52] U. MAAS AND S.B. POPE. *Laminar flame calculations using simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds*. Symposium (International) on Combustion **27**, 1349–1356 (1994). [32](#)
- [53] B. FIORINA, O. GICQUEL, L. VERVISCH, S. CARPENTIER, AND N. DARABIHA. *Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation*. Combust. Flame **140**, 147–160 (2005). [34](#), [92](#)
- [54] H. PITSCH AND N. PETERS. *A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects*. Combust. Flame **114**, 26–40 (1998). [34](#)

- [55] R. BORCHI AND M. CHAMPION. *Modélisation et théorie des flammes*. Technip (2000). [34](#)
- [56] B. FIORINA, R. BARON, O. GICQUEL, D. THÉVENIN, S. CARPENTIER, AND N. DARABIHA. *Modelling non adiabatic partially premixed flames using flame prolongation of ILDM*. *Combust. Theory and Modelling* **7**, 449–470 (2003). [34](#), [35](#)
- [57] M. RULLAUD. *Modélisation de la combustion turbulente via une méthode de tabulation de la cinétique chimique détaillée couplée à des fonctions densités de probabilité et application aux foyers aéronautiques*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France (2004). [34](#), [35](#)
- [58] P. DOMINGO, L. VERVISCH, AND D. VEYNANTE. *Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow*. *Combust. Flame* **152**, 415–432 (2008). [35](#), [92](#), [104](#)
- [59] S. PAYET. *Analyse de l’oxy-combustion en régime dilué par simulation des grandes échelles de la turbulence*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen, France (2007). [35](#)
- [60] V. SUBRAMANIAN, P. DOMINGO, AND L. VERVISCH. *Large-eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner*. *Combust. Flame* **157**, 579–601 (2010). [35](#), [104](#)
- [61] H.F. CALCOTE. *Mechanisms for the formation of ions in flames*. *Combust. Flame* **1**, 385–403 (1957). [36](#)
- [62] H.F. CALCOTE. *Ion production and recombination in flames*. Symposium (International) on Combustion **8**, 184–199 (1961). [37](#)
- [63] J. PEETERS AND C. VINCKIER. *Production of chemi-ions and formation of CH and CH₂ radicals in methane-oxygen and ethylene-oxygen flames*. Symposium (International) on Combustion **15**, 969–977 (1975). [37](#)
- [64] C. VINCKIER, M.P. GARDNER, AND K.D. BAYES. *A study of some primary and secondary chemi-ionization reactions in hydrocarbon oxidations*. Symposium (International) on Combustion **16**, 881–889 (1977). [37](#)
- [65] T.A. COOL AND P.J.H. TJSSEM. *Direct observations of chemi-ionization in hydrocarbon flames enhanced by laser excited CH*(A²Δ) and CH*(B²Σ⁻)*. *Chem. Phys. Lett.* **111**, 82–88 (1984). [37](#)
- [66] D.E. PHIPPEN AND K.D. BAYES. *Evidence for two independent chemi-ionization processes in the (O+C₂H₂) reaction*. *Chem. Phys. Lett.* **164**, 625 (1989). [37](#)
- [67] A.B. FIALKOV, K.YA. KALINICH, AND B.S. FIALKOV. *Experimental determination of primary ions in flame*. Symposium (International) on Combustion **24**, 785–791 (1992). [37](#)
- [68] R.C. BROWN AND A.N. ERASLAN. *Prediction of ionic structure in lean and close-to-stoichiometric acetylene flames*. *Combust. Flame* **73**, 1–21 (1988). [37](#), [40](#), [41](#), [89](#), [91](#), [95](#), [97](#)

Références bibliographiques

- [69] A.N. ERASLAN AND R.C. BROWN. *Chemiionization and ion-molecule reactions in fuel-rich acetylene flames*. Combust. Flame **73**, 1–21 (1988). [37](#), [40](#), [41](#), [89](#), [91](#), [97](#)
- [70] J.M. GOODINGS, D.K. BOHME, AND T.M. SUGDEN. *Positive ion probe of methane-oxygen combustion*. Symposium (International) on Combustion **16**, 891–902 (1977). [37](#), [40](#), [93](#)
- [71] J.M. GOODINGS, D.K. BOHME, AND CHUN-WAI NG. *Detailed ion chemistry in methane—oxygen flames. i. positive ions*. Combust. Flame **36**, 27–43 (1979). [xii](#), [xiii](#), [37](#), [38](#), [39](#), [40](#), [90](#), [93](#), [96](#), [97](#), [112](#), [114](#), [115](#), [116](#), [119](#), [121](#)
- [72] J.M. GOODINGS, D.K. BOHME, AND CHUN-WAI NG. *Detailed ion chemistry in methane—oxygen flames. ii. negative ions*. Combust. Flame **36**, 45–62 (1979). [xii](#), [xiii](#), [37](#), [39](#), [40](#), [42](#), [90](#), [93](#), [96](#), [97](#), [100](#), [112](#), [114](#), [115](#), [116](#), [119](#), [121](#)
- [73] T. PEDERSEN AND R. BROWN. *Simulation of electric field effects in premixed methane flames*. Combust. Flame **94**, 433–448 (1993). [37](#), [41](#), [89](#), [90](#), [91](#), [95](#), [97](#)
- [74] J. HU, B. RIVIN, AND E. SHER. *The effect of an electric field on the shape of co-flowing and candle-type methane-air flames*. Exp. Therm. Fluid Sci **21**, 124–133 (2000). [37](#), [41](#), [79](#), [82](#), [87](#), [91](#), [95](#), [97](#), [173](#)
- [75] K.E. ULYBYSHEV. *Calculation of the effect of a constant electric field on the gas dynamics and nitrogen oxide emission in a laminar diffusion flame*. Translated from Izvestiya Rossiiskoi Akademii Nauk, Mekhanika Zhidkosti i Gazan, Moscow **1**, 48–53 (2000). [37](#), [41](#), [70](#), [82](#), [97](#), [173](#)
- [76] J. PRAGER, U. RIEDEL, AND J. WARNATZ. *Modeling ion chemistry and charged species diffusion in lean methane-oxygen flames*. Proc. Combust. Inst. **31**, 1129–1137 (2007). [xii](#), [37](#), [38](#), [90](#), [91](#), [93](#), [96](#), [97](#), [99](#), [112](#), [115](#), [116](#), [122](#)
- [77] K. YAMASHITA, S. KARNANI, AND D. DUNN-RANKIN. *Numerical prediction of ion current from a small methane jet flame*. Combust. Flame **156**, 1227–1233 (2009). [37](#), [41](#), [80](#), [82](#), [87](#), [89](#), [91](#), [95](#), [97](#), [173](#)
- [78] D.B. OLSON AND H.F. CALCOTE. *Particulate carbon, formation during combustion*. in : D.C. Siegl, G.W. Smith, Editors Plenum Press, New York page 177 (1981). [37](#)
- [79] A. VAN TIGGELEN. *Oxydations et combustions*. Technip, Paris (1968). [38](#), [40](#)
- [80] I.L. PANKRATEVA G.S. ARAVIN, P.A. VLASOV AND V.A. POLYANSKII. *Using of electric probes to investigate dense non-instable plasma when non-equilibrium chemical reactions are available*. Report of the Mechanics Institute of Moscow State University N 2507 **1981**, 1. [39](#)
- [81] T.M. SUGDEN, M.J GOODINGS, J.M. JONES, AND D.A. PARKES. *Thermal and chemi-ionization processes in afterburning rocket exhausts*. Combustion Institute European Symposium. pages 250–255 (1973). [39](#)

- [82] J. PEETERS, C. VINCKIER, AND A. VAN TIGGELEN. *Formation and behavior of chemi-ions in flames*. *Oxid. Combustion. Rev.* **4**, 93–132 (1969). [39](#), [41](#), [95](#), [99](#)
- [83] G. WORTBERG. *Ion-concentration measurements in a flat flame at atmospheric pressure*. *Proc. Combust. Inst.* **10**, 651–655 (1965). [xii](#), [xiii](#), [39](#), [112](#), [114](#), [117](#), [120](#), [122](#)
- [84] H.F. CALCOTE, S.C. KURZIUS, AND W.J. MILLER. *Negative and secondary ion formation in low-pressure flames*. *Proc. Combust. Inst.* **1**, 605 (1965). [39](#), [40](#), [41](#)
- [85] J.L. DELFAU, P. MICHAUD, AND A. BARASSIN. *Formation of small and large positive ions in rich and sooting low-pressure ethylene and acetylene premixed flames*. *Combust. Sci. Technol.* **20**, 165–177 (1979). [39](#), [40](#)
- [86] P. GERHARDT, K.H. HOMANN, S. LOFFLER, AND H. WOLF. *Large ionic species in sooting acetylene and benzene flames*. *Agard Conf. Proc.* 422. PEP Syrup, Chania, Crete, Greece page 22 (1987). [39](#)
- [87] H.F. CALCOTE AND D.G. KEIL. *The role of ions in soot formation*. *Third International Seminar on Flame Structure, Alma-Ata, USSR* **62**, 815–824 (1989). [39](#)
- [88] E.L. DAVIDCHUK, V.M. MALTSEV, AND A.S. ROGACHEV. *Ionization mechanism in ethylene-nitrogen oxide flames*. *Combustion, Explosion, and Shock Waves* **16**, 630–633 (1980). [39](#)
- [89] S.D.T AXFORD AND A.N. HAYHURST. *Ionisation in premixed fuel-lean flames of H₂, O₂ and N₂ . part 1.naturally occurring positive ions*. *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **91**, 837–833 (1995). [39](#)
- [90] S.D.T AXFORD AND A.N. HAYHURST. *Ionisation in premixed fuel-lean flames of H₂, O₂ and N₂ . part 2.ions from alkali-metal additives*. *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **91**, 835–841 (1995). [39](#)
- [91] J.A. GREEN AND T.M. SUGDEN. *Some observations on the mechanism of ionization in flames containing hydrocarbons*. *9th Symposium (International) on Combustion* pages 607–621 (1963). [39](#), [41](#)
- [92] C. FRANÇOIS AND P.Y. VAN TIGGELEN. *Oxidation communications*. No. 2 page 163 (1980). [39](#)
- [93] E. D. HUCKABY, B. CHORPENING, AND J. THORNTON. *Computational fluid dynamics modelling of the operation of a flame ionization sensor*. *US Combustion Meeting* (2007). [41](#), [80](#), [82](#), [87](#), [89](#), [95](#), [97](#), [173](#)
- [94] A. FEUGIER AND A. VAN TIGGELEN. *Identification of negative flame-ions*. *Tenth Symposium (International) on Combustion* **1**, 621–624 (1965). [41](#)
- [95] P.F. KNEWSTUBB AND T.M. SUGDEN. *Mass spectrometry of the ions present in hydrocarbon flames*. *Symposium (International) on Combustion* **7**, 247–253 (1958). [41](#)

Références bibliographiques

- [96] H.F. CALCOTE. *Ion-molecule reactions*. (J.L. Franklin, Ed.) Plenum Press **1** (1972). [42](#)
- [97] J.M. GOODINGS, S.D. TANNER, AND D.K. BOHME. *Hydrocarbon ions in fuel-rich, CH₄-C₂H₂-O₂ flames as a probe for the initiation of soot : interpretation of the ion chemistry*. *Canad. J. Chem.* **60**, 2766–2776 (1982). [42](#)
- [98] H.S. PERGAMENT AND H.F. CALCOTE. *Thermal and chemi-ionization processes in afterburning rocket exhausts*. Symposium (International) on Combustion **11**, 597–611 (1967). [42](#)
- [99] A.J.C. NICHOLSON AND D.L. SWINGLER. *Ion formation in the flame ionization detector*. *Combust. Flame* **39**, 43–52 (1980). [42](#)
- [100] T. UNFER AND J.P. BOEUF. *Modelling of a nanosecond surface discharge actuator*. *J. Phys. D : Appl. Phys.* **42** (2009). [46](#)
- [101] P. FAUCHAIS. *Technologies plasma : applications au traitement des déchets*. *Techniques de l'ingénieur* **G2055** (2007). [46](#)
- [102] M. MOISAN, J. BARBEAU, M.C. CREVIER, J. PELLETIER, N. PHILIP, AND B. SAOUDI. *Plasma sterilization. methods and mechanisms*. *Pure Appl. Chem.* **74**, 349–358 (2002). [46](#)
- [103] J.L. DELCROIX. *Gaz ionisés et plasmas*. *Techniques de l'ingénieur* **D32** (1980). [46](#)
- [104] J.L. DELCROIX. *Physique des Plasmas, Tome 1*. monographies DUNOD (1963). [47](#)
- [105] P. FAUCHAIS. *Gaz ionisés et plasmas*. *Techniques de l'ingénieur* **AF3560** (2000). [xi](#), [48](#)
- [106] J.L. DELCROIX AND A. BERS. *Physique des plasmas, Tome 1*. InterEditions / CNRS Editions (1994). [48](#), [63](#)
- [107] N. POTTIER. *Physique statistique hors d'équilibre : processus irréversibles linéaires*. EDP Sciences, CNRS Editions (2007). [52](#)
- [108] S. CHAPMAN AND T.G. COWLING. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press (1970). [58](#)
- [109] H. FERZIGER AND H.G. KAPER. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland, Amsterdam (1972). [58](#)
- [110] G.M. KREMER. *An introduction to the Boltzmann equation and transport processes in gases*. Springer (2010). [58](#)
- [111] J.L. DELCROIX. *Physique des Plasmas, Tome 2 : Gaz faiblement ionisés*. monographies DUNOD (1966). [58](#), [88](#), [89](#)
- [112] J.L. DELCROIX AND A. BERS. *Physique des plasmas, Tome 2*. InterEditions / CNRS Editions (1994). [58](#), [63](#), [64](#), [66](#)

- [113] J.P. BOEUF AND L.C. PITCHFORD. *Electrohydrodynamic force and aerodynamic flow acceleration in surface dielectric barrier discharge*. J. Appl. Phys. **97**, 349–358 (2005). [58](#)
- [114] C.C. LEIBY AND H.J. OSKAM. *Volume forces in plasmas*. The Physics of Fluids **10(9)**, 1992–1996 (1967). [59](#), [60](#), [87](#)
- [115] K. CRINER. *Stabilisation de flammes de diffusion turbulentes assistée par plasma hors-équilibre et par champ électrique*. Thèse de Doctorat, Université de Rouen, France (2008). [59](#), [60](#), [78](#), [81](#), [87](#), [123](#), [125](#), [133](#), [153](#), [164](#), [166](#), [183](#)
- [116] A. BLANC. *Recherches sur les mobilités des ions dans les gaz*. J. Phys. **7**, 825 (1908). [63](#)
- [117] B.M. SMIRNOV. *Physics of ionized gases*. John Wiley and sons, INC (2001). [63](#)
- [118] V. GIOVANGIGLI. *Multicomponent transport algorithms for partially ionized mixtures*. J. Computational Phys. **229**, 4117–4142 (2010). [63](#)
- [119] Y. ITIKAWA. *Momentum-transfer cross sections for electron collisions with atoms and molecules*. Atom. Data Nucl. Data Tables **14**, 1–10 (1974). [63](#)
- [120] Y. ITAKAWA. *Momentum-transfer cross sections for electron collisions with atoms and molecules : Revision and supplement*. Atom. Data Nucl. Data Tables **21**, 69–75 (1977). [63](#)
- [121] Y. ITIKAWA, K. TAKAYANAGI, AND T. IWAI. *Annotated bibliography on electron collisions with atomic positive ions : Excitation and ionization*. Atom. Data Nucl. Data Tables **31**, 215–274 (1984). [63](#)
- [122] Y. ITIKAWA. *Annotated bibliography on electron collisions with atomic positive ions : Excitation and ionization, 1983-1989*. Atom. Data Nucl. Data Tables **49**, 209–256 (1991). [63](#)
- [123] Y. ITIKAWA. *Annotated bibliography on electron collisions with atomic positive ions : Excitation and ionization, 1990-1994*. Atom. Data Nucl. Data Tables **63**, 315–351 (1996). [63](#)
- [124] Y. ITIKAWA. *Annotated bibliography on electron collisions with atomic positive ions : Excitation and ionization, 1995-1999*. Atom. Data Nucl. Data Tables **80**, 117–146 (2002). [63](#)
- [125] T. SHIRAI, T. TABATA, H. TAWARA, AND Y. ITIKAWA. *Analytic cross sections for electron collisions with hydrocarbons : CH₄, C₂H₆, C₂H₄, C₂H₂, C₃H₈, and C₃H₆*. Atom. Data Nucl. Data Tables **80**, 147–204 (2002). [63](#)
- [126] H. W. ELLIS, R. Y. PAI, E. W. MCDANIEL, E. A. MASON, AND L. A. VIEHLAND. *Transport properties of gaseous ions over a wide energy range*. Atom. Data Nucl. Data Tables **17**, 177–210 (1976). [64](#)

Références bibliographiques

- [127] H. W. ELLIS, E. W. MCDANIEL, D. L. ALBRITTON, L. A. VIEHLAND, AND E. A. MASON S. L. LIN. *Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. part ii.* *Atom. Data Nucl. Data Tables* **22**, 179–217 (1978). [64](#)
- [128] H. W. ELLIS, M. G. THACKSTON, E. W. MCDANIEL, AND E. A. MASON. *Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. part iii.* *Atom. Data Nucl. Data Tables* **31**, 113–151 (1984). [64](#)
- [129] L.A. VIEHLAND AND E.A. MASON. *Transport properties of gaseous ions over a wide energy range. part iv.* *Atom. Data Nucl. Data Tables* **60**, 37–95 (1995). [64](#)
- [130] *Tables of physical and chemical constants. 2.1.2 barometry.* Kaye and Laby Online **Version 1.1**, www.kayelaby.npl.co.uk (2008). [65](#)
- [131] M. THIELE, J. WARNATZ, AND U. MAAS. *Geometrical study of spark ignition in two dimensions.* *Combust. Theor. Model.* **4**, 413–434 (2000). [68](#)
- [132] N.B. ANIKIN, S.A. BOZHENKOV, D.B. ZATSEPIN, E.I. MINTOUSOV, S.B. PANCHE-SHNYI, S.M. STARIKOVSKAIA, AND A.Y. STARIKOVSKY. *Chemistry of low temperature plasma.* In *Encyclopedia of Low-Temperature Plasma, Moscow vol. VIII-I* (2005). [68](#)
- [133] V ADAMOVICH, I. CHOI, N. JIANG, J.H. KIM, S. KESHAV, W.R. LEMPERS, E. MINTUSOV, M. NISHIHARA, M. SAMIMY, AND M. UDDI. *Plasma assisted ignition and high-speed flow control : non-thermal and thermal effects.* *Plasma Sources Sci. Technol.* **18** (2009). [68](#)
- [134] ENERGIE PLUS. *Les plasmas froids contre la pollution.* le supplément technique d’Energie Plus. N° **271** (2001). [69](#)
- [135] M. SAITO, M. SATO, AND K. SAWADA. *Variation of flame shape and soot emission by applying electric field.* *J. Electrostatics* **39**, 305–311 (1997). [69](#)
- [136] M. SAITO, T. ARAI, AND M. ARAI. *Control of soot emitted from acetylene diffusion flames by applying an electric field.* *Combust. Flame* **119**, 356–366 (1999). [69](#)
- [137] B. VATASHIN, V.A. LINKHTER, V.A. SEPP, AND V.I. SHULGIN. *Effect of an electric field on the nitrogen oxide emission and structure of a laminar propane diffusion flame.* *Fluid. Dyn.* **30**, 166–174 (1995). [70](#), [71](#)
- [138] V.A. SEPP AND K.E. ULYBYSHEV. *Experimental investigation of the emission characteristics of laminar diffusion flames in constant electric field of different polarity.* *High Temp.* **35**, 815–817 (1997). [70](#), [71](#)
- [139] M. ZAKE, D. TURLAJS, AND M. PURMALS. *Electric field control of NOX formation in the flame channel flows.* *Global Nest : the Int. J.* **2**, 99–108 (2000). [70](#)
- [140] M. ZAKE, I. BARMINA, AND D. TURLAJS. *Electric field control of polluting emissions from a propane flame.* *Global Nest : the Int. J.* **3**, 95–108 (2001). [70](#)

- [141] A. SAKHRIEH, G. LINS, F. DINKELACKER, T. HAMMER, A. LEIPERTZ, AND D.W. BRANSTON. *The influence of pressure on the control of premixed turbulent flames using an electric field*. Combust. Flame **143**, 313–322 (2005). 71
- [142] F.J. WEINBERG. *The effects of electric fields on combustion processes*. in Advanced Combustion Methods, Academic Press Inc., London pages 331–394 (1986). 73
- [143] F.A. LAVROV AND F.E. MALINOVSKY. J. Phys. Chem. (Rus) **4**, 104 (1933). 73
- [144] H.F. CALCOTE. *Effet of DC electric field on burner flame*. Princeton University, Project Squid Technical Report (1946). 73
- [145] H.F. CALCOTE AND R.N. PEASE. *Electrical properties of flames. burner flames in longitudinal electric fields*. Industrial and Engineering Chemistry **43**, 2726–2731 (1951). 73
- [146] M.L. POLANYI AND G.H. MARKSTEIN. *Phenomena in electrically and acoustically disturbed flames*. Cornell Aeronautical Lab., Project Squid Technical Memorandum No. CAL-3 (1947). 73
- [147] U.M. STEPANOV AND B.G. D’YACHKOV. *Ionization in Flame and Electric Field*. in Metallurgy, Moscow (1968). 73
- [148] N.A. ISAEV. *The mechanism of strong d.c. electric field affect a flame*. in Physics of Combustion and Methods of its Invesrigarion pages 58–73 (1971). 74
- [149] N.A. ISAEV. *Investigations of general regularities and mechanism of electric field affects flame*. in Physics of Combustion and Methods of its Invesrigarion pages 48–56 (1972). 74
- [150] N.A. LSAEV AND S.A. ABMKOV. *The investigations of flame stabilization by electric field*. in Physics of Combustion and Methods of its Invesrigarion pages 57–63 (1972). 74
- [151] N.A. ISAEV. *The experimental investigation of electric field influence on a laminar flame stabilization*. Dissertation, Chuvashsky University, USSR (1974). 74
- [152] V.I. BOTOVA AND B.S. FIALKOV. *Effect of electric field on the inner zone of a hydrocarbon flame*. Combustion, Explosion, and Shock Waves **23**, 691–693 (1987). 74, 140
- [153] H.F. CALCOTE AND C.H. BERMAN. *Increased methane-air stability limits by a dc electric field*. ASME Fossil Fuels Combustion Symposium **PD-25**, 25–31 (1989). 74
- [154] M.K. KIM, S.K. RYU, S.H. WON, AND S.H. CHUNG. *Electric fields effect on liftoff and blowoff of nonpremixed laminar jet flames in a coflow*. Combust. Flame **157**, 17–24 (2010). xii, 75, 76, 78, 81, 140, 183
- [155] D.L. WISMAN, S.D. MARCUM, AND B.N. GANGULY. *Electrical control of the thermodiffusive instability in premixed propane-air flames*. Combust. Flame **151**, 639–648 (2007). xi, 75, 77, 78, 81, 140

Références bibliographiques

- [156] S.H. WON, M.S. CHA, C.S. PARK, AND S.H. CHUNG. *Effect of electric fields on reattachment and propagation speed of tribrachial flames in laminar coflow jets*. Proc. Combust. Inst **31**, 963–970 (2007). [75](#), [76](#), [78](#), [81](#), [140](#)
- [157] Y.S. KO AND S.H. CHUNG. *Propagation of unsteady tribrachial flames in laminar non-premixed jets*. Combust. Flame **118**, 151–163 (1999). [76](#)
- [158] J. LEE, S.H. WON, S.H. JIN, S.H. CHUNG, O. FUJITA, AND K. ITO. *Propagation speed of tribrachial (triple) flame of propane in laminar jets under normal and micro gravity conditions*. Combust. Flame **134**, 411–420 (2003). [76](#)
- [159] S.H. WON, S.K. RYU, M.K. KIM, M.S. CHA, AND S.H. CHUNG. *Effect of electric fields on the propagation speed of tribrachial flames in coflow jets*. Combust. Flame **152**, 496–506 (2008). [76](#), [78](#), [81](#), [183](#)
- [160] M.K. KIM, S.H. CHUNG, AND H.H. KIM. *Effect of ac electric fields on the stabilization of premixed bunsen flames*. Proc. Combust. Inst **33**, 1137–1144 (2011). [77](#), [81](#), [138](#), [183](#)
- [161] M.K. KIM, S.H. CHUNG, AND H.H. KIM. *Effect of electric fields on the stabilization of premixed laminar bunsen flames at low ac frequency : Bi-ionic wind effect*. Combust. Flame (2011). [77](#), [81](#), [138](#), [183](#)
- [162] S.D. MARCUM AND B.N. GANGULY. *Electric-field-induced flame speed modification*. Combust. Flame **143**, 27–36 (2005). [77](#), [78](#), [81](#)
- [163] J. VINOGRADOV, E. SHER, I. RUTKEVICH, AND M. MOND. *Voltage-current characteristics of a flame-assisted unipolar corona*. Combust. Flame **127**, 2041–2050 (2001). [78](#), [79](#), [81](#), [140](#)
- [164] H.A. WILSON. *Electrical conductivity of flames*. Rev. Mod. Phys. **3**, 156 (1930). [87](#)
- [165] F. KINBARA AND H. IKEGAMI. *On the positive and negative ions in diffusion flames*. Combust. and Flame **1**, 199 (1957). [88](#), [178](#)
- [166] D. BRADLEY AND S.M.A. IBRAHIM. *The effects of electrical fields upon electron energy exchanges in flame gases*. Combust. and Flame **22**, 43–52 (1974). [88](#)
- [167] P.J. MAYO AND F.J. WEINBERG. *On the size, charge and number-rate of formation of carbon particles in flames subjected to electric fields*. Proc. Roy. Soc. London **319**, 351–371 (1970). [88](#)
- [168] E/N. TARAN. *Study of structure of planar diffusion flames of low-pressure by oncoming jets using spectroscopy and ionization methods. in proceedings of workshop on the gas flame structure, part 2.* ed V.K. Baev, Novosibirsk, USSR **Version 1.1**, 123–143(Russian) (1984). [88](#)
- [169] M. KONO, F.B. CARLETON, A.R. JONES, AND F.J. WEINBERG. *The effect of nonsteady electric fields on sooting flames*. Combust. Flame **78**, 357 (1989). [88](#)

- [170] M. MITCHNER AND C.H. KRUGER JR. *Partially ionized gases*. Wiley, New York (1973). 88
- [171] A. BEKSTEIN, M. BENHENNI, AND M. YOUSFI. Swarm data of $(\text{H}_2\text{O})_n\text{H}^+$ ions in N_2O_2 and dry air. In *29th ICPIG, July 12-17, Cancún, México* (2009). 88, 178
- [172] J. PRAGER. *Modeling and Simulation of Charged Species in Lean Methane-Oxygen Flames*. Thèse de Doctorat, Université de Ruprecht Karls, Allemagne (2005). xii, xiii, 90, 112, 115, 116, 117, 118, 119, 122
- [173] A. M. STARIK AND N. S. TITOVA. *Kinetics of ion formation in the volumetric reaction of methane with air*. *Combustion Explosion and Shock Waves* **38**, 253–268 (2002). 91, 99
- [174] O. GICQUEL, N. DARABIHA, AND D. THEVENIN. *Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion*. *Proc. Combust. Inst.* **28**, 1901–1908 (2000). 92
- [175] S. SELLE. *Transport coefficients of ionized species in reactive flows*. Thèse de Doctorat, Université de Heidelberg, Allemagne (2002). 98
- [176] Y. H. LE TEUFF, T. J. MILLAR, AND A. J. MARKWICK. *The umist database for astrochemistry 1999*. *Astronomy and Astrophysics Supplement*, <http://www.rate99.co.uk> **146**, 157–168 (2000). 98, 99, 100
- [177] M. CAPITELLI, C. M. FERREIRA, B. F. GORDIETS, AND A. I. OSIPOV. *Plasma Kinetics in Atmospheric Gases*. Springer (2000). 99
- [178] A. N. HAYHURST. *The mass spectrometric sampling of ions from atmospheric pressure flames as exemplified by the reactions of OH⁻ and O⁻ in O₂ rich flames*. *Pure and Applied Chemistry* **65**, 285–295 (1993). 99
- [179] S. M. STARIKOVSKAIA, A., YU STARIKOVSKII, AND D. V. ZATSEPIN. *Hydrogen oxidation in a stoichiometric hydrogen-air mixture in the fast ionization wave*. *Combustion Theory and Modelling* **5**, 97–129 (2001). 99, 100
- [180] D. K. BOHME, J. M. GOODINGS, AND CHUN-WAI NG. *Chemical ionization as a probe for neutral constituents upstream in a methane/oxygen flame*. *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Physics* **24**, 335–354 (1977). 99
- [181] S. GORDON AND B. J. MCBRIDE. *Computer program for calculation of complex chemical equilibrium composition, rocket performance, incident and reflected shocks and chapman-jouguet detonations*. NASA **SP-273** (1971). 103, 201
- [182] F. DUCROS, F. LAPORTE, T. SOULÉRES, V. GUINOT, P. MOINAT, AND B. CARUELLE. *High-order fluxes for conservative skew-symmetric-like schemes in structured meshes : Application to compressible flows*. *J Comput Phys.* **161**, 114–139 (2000). 104

Références bibliographiques

- [183] R. C. SWANSON AND E. TURKEL. *On central-difference and upwind schemes*. J. Comput. Phys. **101**, 292–306 (1992). [104](#)
- [184] S. TATSUMI, L. MARTINELLI, AND A. JAMESON. *Flux-limited schemes for the compressible navier-stokes equations*. AIAA Journal **33**(2), 252–261 (1995). [104](#)
- [185] S. GOTTLIEB AND C.W. SHU. *Total variation diminishing runge-kutta schemes*. Mathematics of Computation **67**, 73–85 (1998). [104](#)
- [186] G. JIANG AND C. SHU. *Efficient implementation of weighted eno schemes*. J. Comput. Phys. **126**, 202–228 (1996). [104](#)
- [187] T. POINSOT AND S. LELE. *Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows*. J. Comput. Phys. **101**, 104–109 (1992). [104](#)
- [188] G. LODATO, P. DOMINGO, AND L. VERVISCH. *Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows*. J. Comput. Phys. **227**, 5105–5143 (2008). [104](#)
- [189] G. LODATO. *Conditions aux limites tridimensionnelles pour la simulation directe et aux grandes échelles des écoulements turbulents. Modélisation de sous-maille pour la turbulence en région de proche paroi*. Thèse de Doctorat, INSA de Rouen (2008). [104](#)
- [190] P. DOMINGO, L. VERVISCH, S. PAYET, AND R. HAUGUEL. *Numerical simulation of a premixed turbulent v flame and les of a ducted flame using a fsd-pdf subgrid scale closure with FPI-tabulated chemistry*. Combust. Flame **143**, 566–586 (2005). [104](#)
- [191] G. LODATO, L. VERVISCH, AND P. DOMINGO. *A compressible wall-adapting similarity mixed model for large-eddy simulation of the impinging round jet*. Phys. Fluids **21**(3) (2009). [104](#)
- [192] G. GODEL, P. DOMINGO, AND L. VERVISCH. *Tabulation of nox chemistry for large-eddy simulation of non-premixed turbulent flames*. Proc. Combust. Inst. **32**, 1555–1561 (2009). [104](#)
- [193] S.D. CONTE. *Elementary Numerical Analysis*. McGraw-Hill, New York (1972). [105](#)
- [194] F.A. WILLIAMS. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA (1985). [141](#)
- [195] P. CLAVIN. *Dynamics of combustion fronts in premixed gases : From flames to detonations*. Proc. Combust. Inst **28**, 569–585 (2000). [141](#)
- [196] S. GHOSAL AND L. VERVISCH. *Stability diagram for lift-off and blowout of a round jet laminar diffusion flame*. Combust. Flame **124**, 646–655 (2001). [168](#)
- [197] K.A. WATSON, K. M. LYONS, J.M. DONBAR, AND C.D. CARTER. *Observations on the leading edge in lifted flame stabilization*. Combust. Flame **119**, 199–202 (1999). [168](#)

- [198] J. PRAGER, H.N. NAJM, M. VALORANI, AND D.A. GOUSSIS. *Structure of n-heptane/air triple flames in partially-premixed mixing layers*. Combust. Flame **158**, 2128–2144 (2011). [183](#)

Annexe

A.1 Données thermodynamiques

La base de données, ci-dessous, est utilisée pour calculer les propriétés thermodynamiques de chacune des espèces présentes dans le mécanisme réactionnel des espèces chargées (section 5.3.3.1). En utilisant ces données, la capacité thermique molaire, l'enthalpie molaire et l'entropie molaire sont alors calculées via les formules exposées dans la section (5.3.3.3) :

$$\frac{\bar{C}_{pk}(T)}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4$$

$$\frac{\bar{H}_k^0(T)}{R} = a_1T + \frac{a_2}{2}T^2 + \frac{a_3}{3}T^3 + \frac{a_4}{4}T^4 + \frac{a_5}{5}T^5 + a_6$$

$$\frac{\bar{S}_k^0(T)}{R} = a_1 \ln T + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7$$

Les données sont présentées sous le format standard de la NASA [181]. Chaque ensemble de données se compose de deux sous-ensembles de coefficients (a_1, a_2, \dots, a_7), qui sont utilisés pour ajuster au mieux la dépendance des propriétés thermodynamiques à la température. Un de ces deux sous-ensembles concerne donc une plage de basses températures, et l'autre correspond à la gamme des températures relativement plus élevées.

La première ligne de chaque ensemble contient le nom de l'espèce, suivie d'un commentaire optionnel et de la composition élémentaire de cette espèce. Ensuite, les gammes de température sont précisées : d'abord les limites basse et haute de la plage des températures, pour laquelle les données sont valables, sont données. Ensuite, la température, qui sépare les deux rangées de hautes et de basses températures, est fournie. Les trois suivantes lignes exposent les 14 coefficients (a_1, a_2, \dots, a_7), d'abord pour la gamme de hautes températures puis pour celle de basses températures.

Annexe

H	120186H	1		G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.02500000E+02	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00		
0.02547162E+06	-0.04601176E+01	0.02500000E+02	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00		
0.00000000E+00	0.00000000E+00	0.02547162E+06	-0.04601176E+01						
HO2	20387H	1O	2	G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.04072191E+02	0.02131296E-01	-0.05308145E-05	0.06112269E-09	-0.02841164E-13					
-0.15797270E+03	0.03476029E+02	0.02979963E+02	0.04996697E-01	-0.03790997E-04					
0.02354192E-07	-0.08089024E-11	0.01762273E+04	0.09222724E+02						
H2	120286H	2		G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.02991423E+02	0.07000644E-02	-0.05633828E-06	-0.09231578E-10	0.15827519E-14					
-0.08350340E+04	-0.13551101E+01	0.03298124E+02	0.08249441E-02	-0.08143015E-05					
-0.09475434E-09	0.04134872E-11	-0.10125209E+04	-0.03294094E+02						
H2O	20387H	2O	1	G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.02672145E+02	0.03056293E-01	-0.08730260E-05	0.12009964E-09	-0.06391618E-13					
-0.02989921E+06	0.06862817E+02	0.03386842E+02	0.03474982E-01	-0.06354696E-04					
0.06968581E-07	-0.02506588E-10	-0.03020811E+06	0.02590232E+02						
H2O2	120186H	2O	2	G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.04573167E+02	0.04336136E-01	-0.14746888E-05	0.02348903E-08	-0.14316536E-13					
-0.01800696E+06	0.05011369E+01	0.03388753E+02	0.06569226E-01	-0.14850125E-06					
-0.04625805E-07	0.02471514E-10	-0.01766314E+06	0.06785363E+02						
C	121086C	1		G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.02602087E+02	-0.01787081E-02	0.09087041E-06	-0.11499333E-10	0.03310844E-14					
0.08542154E+06	0.04195177E+02	0.02498584E+02	0.08085776E-03	-0.02697697E-05					
0.03040729E-08	-0.11066518E-12	0.08545878E+06	0.04753459E+02						
CH	121286C	1H	1	G	0300.00	5000.00	1000.00		
0.02196223E+02	0.02340381E-01	-0.07058201E-05	0.09007582E-09	-0.03855040E-13					
0.07086723E+06	0.09178373E+02	0.03200202E+02	0.02072875E-01	-0.05134431E-04					
0.05733890E-07	0.01955533E-10	0.07045259E+06	0.03331587E+02						
CHO	HCO	121286H	1C	1O	1	G	0300.00	5000.00	1000.00
0.03557271E+02	0.03345572E-01	-0.13350060E-05	0.02470572E-08	-0.01713850E-12					
0.03916324E+05	0.05552299E+02	0.02898329E+02	0.06199146E-01	-0.09623084E-04					
0.10898249E-07	-0.04574885E-10	0.04159922E+05	0.08983614E+02						
1CH2	CH2(S)	31287C	1H	2	G	0300.00	4000.00	1000.00	
0.03552888E+02	0.02066788E-01	-0.01914116E-05	-0.11046733E-09	0.02021349E-12					
0.04984975E+06	0.01686570E+02	0.03971265E+02	-0.01699088E-02	0.10253689E-05					
0.02492550E-07	-0.01981266E-10	0.04989367E+06	0.05753207E+00						
CH2O	121286C	1H	2O	1	G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.02995606E+02	0.06681321E-01	-0.02628954E-04	0.04737153E-08	-0.03212517E-12					
-0.15320369E+05	0.06912572E+02	0.16527311E+01	0.12631439E-01	-0.01888168E-03					
0.02050031E-06	-0.08413237E-10	-0.14865404E+05	0.13784820E+02						

A.1 Données thermodynamiques

CH2CO	121686C	2H	2O	1	G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.06038817E+02	0.05804840E-01	-0.01920953E-04	0.02794484E-08	-0.14588676E-13					
-0.08583402E+05	-0.07657581E+02	0.02974970E+02	0.12118712E-01	-0.02345045E-04					
-0.06466685E-07	0.03905649E-10	-0.07632636E+05	0.08673553E+02						
CH3	121286C	1H	3		G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.02844051E+02	0.06137974E-01	-0.02230345E-04	0.03785161E-08	-0.02452159E-12					
0.16437809E+05	0.05452697E+02	0.02430442E+02	0.11124099E-01	-0.01680220E-03					
0.16218288E-07	-0.05864952E-10	0.16423781E+05	0.06789794E+02						
CH3OH	121686C	1H	4O	1	G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.04029061E+02	0.09376593E-01	-0.03050254E-04	0.04358793E-08	-0.02224723E-12					
-0.02615791E+06	0.02378195E+02	0.02660115E+02	0.07341508E-01	0.07170050E-04					
-0.08793194E-07	0.02390570E-10	-0.02535348E+06	0.11232631E+02						
CH4	121286C	1H	4		G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.01683478E+02	0.10237236E-01	-0.03875128E-04	0.06785585E-08	-0.04503423E-12					
-0.10080787E+05	0.09623395E+02	0.07787415E+01	0.01747668E+00	-0.02783409E-03					
0.03049708E-06	-0.12239307E-10	-0.09825229E+05	0.13722195E+02						
CO	121286C	1O	1		G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.03025078E+02	0.14426885E-02	-0.05630827E-05	0.10185813E-09	-0.06910951E-13					
-0.14268350E+05	0.06108217E+02	0.03262451E+02	0.15119409E-02	-0.03881755E-04					
0.05581944E-07	-0.02474951E-10	-0.14310539E+05	0.04848897E+02						
CO2	121286C	1O	2		G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.04453623E+02	0.03140168E-01	-0.12784105E-05	0.02393996E-08	-0.16690333E-13					
-0.04896696E+06	-0.09553959E+01	0.02275724E+02	0.09922072E-01	-0.10409113E-04					
0.06866686E-07	-0.02117280E-10	-0.04837314E+06	0.10188488E+02						
C2H2	121386C	2H	2		G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.04436770E+02	0.05376039E-01	-0.01912816E-04	0.03286379E-08	-0.02156709E-12					
0.02566766E+06	-0.02800338E+02	0.02013562E+02	0.15190446E-01	-0.16163189E-04					
0.09078992E-07	-0.01912746E-10	0.02612444E+06	0.08805378E+02						
C2H5	12387C	2H	5		G	0300.00	5000.00	1000.00	
0.07190480E+02	0.06484077E-01	-0.06428064E-05	-0.02347879E-08	0.03880877E-12					
0.10674549E+05	-0.14780892E+02	0.02690701E+02	0.08719133E-01	0.04419838E-04					
0.09338703E-08	-0.03927773E-10	0.12870404E+05	0.12138195E+02						
C2H6	121686C	2H	6		G	0300.00	4000.00	1000.00	
0.04825938E+02	0.13840429E-01	-0.04557258E-04	0.06724967E-08	-0.03598161E-12					
-0.12717793E+05	-0.05239506E+02	0.14625388E+01	0.15494667E-01	0.05780507E-04					
-0.12578319E-07	0.04586267E-10	-0.11239176E+05	0.14432295E+02						
O	selle	O	1O	00	00	G	200.00	30100.00	16800.00
0.63846370E+02	-0.11202832E-01	0.71871680E-06	-0.18543426E-10	0.16566516E-15					
-0.22622359E+06	-0.47840036E+03	0.25991110E+01	-0.97668390E-04	0.34826298E-07					
-0.35243850E-11	0.12158067E-15	0.29186142E+05	0.45660003E+01						

Annexe

OH	121286O	1H	6	G	0300.00	5000.00	1000.00
0.02882730E+02	0.10139743E-02	-0.02276877E-05			0.02174683E-09	-0.05126305E-14	
0.03886888E+05	0.05595712E+02	0.03637266E+02			0.01850910E-02	-0.16761646E-05	
0.02387202E-07	-0.08431442E-11	0.03606781E+05			0.13588605E+01		
O2	selle O	2O	00	00	0G	200.00	30100.00
-0.42477619E+01	0.25114966E-02	-0.20177848E-06			0.64732818E-11	-0.74126978E-16	
0.19124285E+05	0.62595177E+02	0.33368304E+01			0.10016687E-02	-0.27227648E-06	
0.34876004E-10	-0.14592070E-14	-0.10348727E+04			0.53569296E+01		
E-	selle E	1O	00	00	0G	200.00	30100.00
0.25000000E+01	0.00000000E+00	0.00000000E+00			0.00000000E+00	0.00000000E+00	
-0.74537500E+03	-0.11733975E+02	0.25000000E+01			-0.81502608E-17	0.13029867E-20	
-0.72648333E-25	0.13066247E-29	-0.74537500E+03			-0.11733975E+02		
CHO+	C	1H	1O	1	298.15	20000.00	3654.18
0.69157265E+01	0.16631107E-03	-0.18476343E-07			0.90856429E-12	-0.16454441E-16	
0.96129333E+05	-0.18089510E+02	0.28762768E+01			0.49486020E-02	-0.23085306E-05	
0.51121752E-09	-0.43520631E-13	0.99130022E+05			0.65020266E+01		
H3O+	H	3O	1		298.15	20000.00	5430.90
0.89508803E+01	0.25281668E-03	-0.24594397E-07			0.10878318E-11	-0.18090837E-16	
0.64480749E+05	-0.33873319E+02	0.26885232E+01			0.54453654E-02	-0.17055566E-05	
0.24833293E-09	-0.13769440E-13	0.70890268E+05			0.63608217E+01		
O2-	O	2			298.15	6000.00	2008.71
0.42592867E+01	0.22468072E-03	-0.51397955E-07			0.73545978E-11	-0.38558652E-15	
-0.72426252E+04	0.47599697E+00	0.31021718E+01			0.27980875E-02	-0.22651126E-05	
0.86916517E-09	-0.12721884E-12	-0.68074793E+04			0.67609020E+01		
OH-	L 3/93O	1H	1E	1	0G	298.150	6000.00
2.83405701E+00	1.07058023E-03	-2.62459398E-07			3.08376435E-11	-1.31383862E-15	
-1.80186974E+04	4.49464762E+00	3.43279956E+00			6.19656310E-04	-1.89930992E-06	
2.37365946E-09	-8.55103755E-13	-1.82613086E+04			1.06053670E+00	-1.72227709E+04	
O-	RUS 89O	1E	1	0	0G	298.150	6000.00
2.54474868E+00	-4.66695419E-05	1.84912310E-08			-3.18159131E-12	1.98962894E-16	
1.14822713E+04	4.52131018E+00	2.90805921E+00			-1.69804907E-03	2.98069956E-06	
-2.43835127E-09	7.61229313E-13	1.14138341E+04			2.80339097E+00		
N2	selle N	2O	00	00	0G	200.00	30100.00
-0.79881200E+02	0.14669991E-01	-0.87379270E-06			0.22241187E-10	-0.20839676E-15	
0.35703769E+06	0.66412261E+03	0.31894328E+01			0.92107920E-03	-0.22394465E-06	
0.20939065E-10	-0.57639899E-15	-0.98124572E+03			0.45795398E+01		

Tableau A.1 – Données thermodynamiques des espèces participant dans le mécanisme réactionnel utilisé pour décrire la chimie des espèces chargées (cf. section 5.3.3).

A.2 Article : Direct numerical simulation of the effect of an electric field on flame stability



Contents lists available at ScienceDirect

Combustion and Flame

journal homepage: www.elsevier.com/locate/combustflame

Direct numerical simulation of the effect of an electric field on flame stability

Memdouh Belhi, Pascale Domingo*, Pierre Vervisch

CORIA – CNRS and INSA de Rouen, Technopole du Madrillet, BP 8, 76801 Saint-Etienne-du-Rouvray, France

ARTICLE INFO

Article history:

Received 29 January 2010

Received in revised form 4 July 2010

Accepted 12 July 2010

Available online 13 August 2010

Keywords:

Flame stability

Electric field

Ionic wind

Direct numerical simulation

ABSTRACT

The role of electric fields in stabilising combustion is a well-known phenomenon. Among the possible mechanisms favouring the anchorage of the flame base, the ion-driven wind acting directly on flow momentum ahead of the flame base could be the leading one. Direct numerical simulation has been used to verify this hypothesis and lead to a better understanding of diffusion flame base anchoring in the presence of an externally applied voltage. In this context, a simplified modelling approach is proposed to describe combustion in the presence of electric body forces. The model reproduces the tendencies of experimental observations found in the literature. The sensitivity of the flame lift-off height to the applied voltage is studied and the modification of the velocity field ahead of the flame base induced by the electric volume forces is highlighted.

© 2010 The Combustion Institute. Published by Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

Combustion in the lean regime is an efficient way to minimize the emission of pollutants and fuel consumption. The drawback is that instabilities appear which may lead to extinction of the flame or blow-out. Several technical solutions have been proposed to counteract these inconveniences such as modifying the geometry of the burner, introducing swirl or a bluff-body to stabilise the flame by increasing mixing, or adding energy at the flame base with a pilot flame. Active control of flame stability may also be envisaged based on acoustic excitation or application of an electric field.

The impact of the electric field on flames has been evidenced since decennia [1,2]. More recently, in the context of improving the control of combustion, its effect on flame stabilisation has been studied extensively from the experimental point of view. Different kinds of configurations have been addressed: laminar [3] and turbulent [4] combustion, premixed [5] and diffusion [6] flames, in interaction with AC or DC [7,8] electric fields. All studies show improvements in combustion with a negligible energy consumption compared to the thermal power of flames. However, because of the disparities among results, it is difficult to draw conclusions on what is the key physical phenomenon responsible for stabilisation improvement. To answer this question, it is necessary to gain understanding of the mechanisms of the electric field interaction with the flame. Numerical simulation of a flame submitted to an electric field is a valuable approach for achieving this goal.

Complete modelling of electric field interaction with the flame is a very challenging subject which is seldom addressed in the literature. Modelling approaches for combustion in the presence of an external electric field have been developed in the papers from Hu et al. [9] and Ulybyshev [10]. Some assumptions have been made in these models such as supposing a constant electric field intensity in all the computational domain [9] or considering only a transport equation for ions and not for electrons [10]. While Hu et al. address directly the problem of flame stabilisation, Ulybyshev focuses on the reduction of the nitrogen oxide emission by applying an electric field. Papac and Dunn-Rankin [11] have also recently developed a simplified approach for a flame stabilized at the exit of a fuel feed tube, the respective impacts of ion mobility and diffusion on the ion-driven wind are emphasized in this work. Also, Yamashita et al. [12] have proposed a model to describe the underlying mechanisms responsible for the voltage-current characteristic response of a capillary-fed methane diffusion flame in an electric field. In their modelling of the problem, the electric field spatial variation is computed by solving a Poisson equation.

The confirmation of all mechanisms producing improvement in flame stability by applying electric fields is still an open issue. Some authors, as Jagers and Von Engel [13], have concluded that the change of flame behaviour under electric field action is related to chemical effects via activation of reactions due to collisions with electrons and ions. However, for most authors [4,8–10,14], the field-induced body forces, known as ion-driven wind, which may affect the flame dynamics, is mainly responsible for the observed effects. To examine this last assumption, a model presented in the next section of the paper, has been developed. This model does not incorporate possible effects of the electric field on the combustion chemistry and accounts solely for ion-driven wind. The objective

* Corresponding author.

E-mail address: domingo@coria.fr (P. Domingo).

of the paper is to assess the ability of that phenomenon to influence flame stabilization. The retained approach to handle the kinetics of charged species in the flame is then presented and validated. A generic configuration representative of a lifted diffusion methane/air laminar flame is then used to analyse the dynamics of stabilisation of the flame extremity in the presence of an applied electric field.

2. Model description

The problem is governed by the classical transport equations for compressible, gaseous multi-component, reacting flows in the presence of electric body forces.

For a gas of density ρ and flow velocity components u_i , the mass continuity and momentum equations read:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \quad (2)$$

where t and x_i are, respectively, the time and space coordinates, p designates static pressure calculated by the classic perfect gas law and τ_{ij} is the viscous tensor defined as:

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

with μ the dynamic viscosity and $\delta_{i,j}$ the Kronecker symbol.

The components F_i of the electric body force that is exerted on charge carriers when an electric field is imposed are determined from the components E_i of the electric field intensity and charged species concentrations n^+ , n^- :

$$F_i = eE_i(n^+ - n^-) \quad (3)$$

where the + and – subscripts denote properties of positive and negative charge carriers, respectively. e is the electron charge.

The electric field intensity is related to the electric potential V by the simple differential equation:

$$E_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} \quad (4)$$

The Poisson equation describing the electric potential repartition, which evolves in time with charged species concentrations, must be solved at each time step:

$$\nabla^2 V = -e \frac{(n^+ - n^-)}{\epsilon_0} \quad (5)$$

ϵ_0 represents the permittivity of free space. The momentum transfer from the charged particles to the neutral gas is due to collisions between charged particles and neutral particles. In this approach, it is assumed that the momentum gained by the ions from the electric field is totally and instantaneously transferred into the neutral gas.

Transport equations for the chemical species (neutral or charged) present in the flow have to be solved:

$$\frac{\partial \rho Y^k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y^k}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho Y^k V_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}^k \quad (6)$$

The expression of the diffusion velocity, V^k , depends on k representing a neutral species, an ion or an electron. For neutral species, the diffusion flux is simply represented by Fick's law with a constant Schmidt number of 0.7. For charged species, the following relation is used [15]:

$$\rho Y^k V_j^k = -\rho D^k \frac{\partial Y^k}{\partial x_j} + S^k \rho \mu^k Y^k E_j \quad (7)$$

where S^k is negative if the species is negatively charged and positive if the species is positively charged. The diffusion coefficient of the

ions is approximated by the diffusion coefficient D of the corresponding neutrals [16]:

$$D^k = D = \frac{\mu}{\rho S^k c}$$

For a very weakly ionized media such as flames, the electron diffusion coefficient is approximated by Delcroix [17]:

$$D^e = \left(\frac{m^i}{m^e} \right)^{0.5} D^i$$

m^e represents the electron mass and m^i is the averaged mass of ions. The value of the mobilities, $\mu^{i,e}$, directly impact on the body forces and then on the intensity of the ion-driven wind. Mobility evolves with temperature and also mixture composition as observed by Papac and Rankin [18]. Nevertheless, the complex determination of the expression of ion or electron mobility is out of the scope of this paper and tests of the sensitivity of the results to the choice of the expression of mobility have not been performed even if dependence may be expected. No definitive expression for the mobility exists yet in the literature and the value recommended by Fialkov [2] for ion, $\mu^i \sim 1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ has been retained in this study. Using the Einstein relationship, the electron mobility, μ^e , is related to μ^i :

$$\mu^e = \left(\frac{D^e}{D^i} \right) \mu^i$$

The expressions of the source terms, $\dot{\omega}^k$, are given in the next section.

The total energy equation reads:

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i E}{\partial x_i} = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial (\tau_{ij} - p \delta_{ij}) u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + f \quad (8)$$

q_i is the heat flux calculated from Fourier's law. The source term \dot{Q} corresponds to the heat release due to combustion. The electric force contribution in total energy transport equation is given by:

$$f = \sum_{k=1}^{N_c} e n^k S^k E_j (u_j + V_j^k)$$

With N_c the number of charged species and n^k the concentration in part/m^3 . The impact of this contribution is not significant since the applied electric field is very weak compared to the total energy variation. Joule heating is absent from Eq. (8) since the applied voltages used in this work are quite small (below 12 kV) and the induced electric current resistive losses can then be neglected.

The approach which is retained is very similar to the one recommended by Hu et al. [9] or Yamashita et al. [12]. These latter authors resolve the Poisson equation to get the local electric field while the first suppose a constant electric field.

2.1. Kinetics for CH₄/air combustion including charged species

Different approaches to tackle the chemistry of ions in flames can be found in the literature. Starik and Titova [19] describe a detailed mechanism for the kinetics of ions during combustion of a methane/air mixture. This mechanism includes around 208 reactions including positive and negative ions. Prager et al. [20] propose a kinetics accounting for 67 different reactions, where positive and negative ions are included and 200 reactions for neutrals. Hu et al. [9] and Yamashita et al. [12] employed reaction mechanisms with less reactions respectively 31 (28 for neutrals and 3 for ions) and 39 (28 for neutral and 11 for ions) and neglected negative ions. Pedersen and Brown [15] still exclude anions from their mechanism which includes 86 reactions. These authors compare the performance of their mechanism to experimental measurements for four different one-dimensional, laminar pre-mixed flames. The neutral major species are fairly well predicted

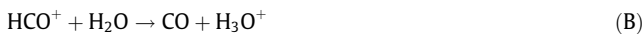
while for the charged species, H_3O^+ , which has the highest concentration, the peak values are obtained with a factor of two between simulation and experiment.

The neutral species serve to produce and convert the charge carriers, that have very low concentrations in flames, consequently, their accurate prediction is a necessary pre-condition to determine the proper distribution of charged species. Thus, a reduced chemical scheme, like that used by the authors [9,12,20,15], may not meet this requirement and may lead to an incorrect prediction of the charged species. In this work, the very detailed GRI 3.0 Methane/Air [21] which contains 325 reactions and 53 neutral species is retained. The hypothesis is made that the concentration of any neutral specie present in the mechanism is always larger than the concentrations of charged species. Then, the production/disappearance of charged species will have no impact on the neutral species concentrations. A simplified mechanism for the kinetics of charged species is adopted as detailed thereafter.

In flames, cations, anions and electrons are produced by a chemi-ionization mechanism [22]. The source of flame ions is generally accepted to be the reaction [15,23]:



The initial ion HCO^+ is rapidly transformed into the H_3O^+ ion [15] via:



This reaction occurs quasi-instantaneously and has a very small characteristic time. One can then assume that HCO^+ is transformed immediately into H_3O^+ and consequently the transport of HCO^+ ion is neglected. Tests with and without this assumption have been performed leading to a maximal difference of only 0.1% between the total ion concentration profiles.

H_3O^+ recombines through dissociative recombination reactions with electrons. Prager et al. [20] have proposed four reactions:



Others authors [9,12,16,15] have assumed that the reaction Eq. (C1) is dominant and propose to neglect Eqs. (C2), (C3) et (C4).

As a result of ion-molecular reactions, H_3O^+ forms other flame positive ions which will not be included in this model:



We note that each molecule of H_3O^+ which reacts with a neutral molecule B gives another cation C^+ , this means that the total quantity of positive ions is that of the H_3O^+ ion before its transformation into other positive species. Moreover, assuming that all ions have practically the same transport coefficients (electric mobility and diffusion coefficient), the local density of the total positive charge will be identical if all positive charged species are transported or if only H_3O^+ is transported. Consequently, the H_3O^+ cation can be considered as the only positively charged carrier.

A large ratio of electrons concentration to negative ions concentration has been found in hydrocarbon flames [24], and electrons are generally considered as the major negative-charge carriers. Following these authors, negative ions are neglected. However, in the low temperature region upstream of the base of the flame, electron attachment to molecular oxygen can be the major process for negatively charged species transformation: $O_2 + e^- + M \rightarrow O_2^- + M$ with $k = 2 \times 10^{-30} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [25]. In this region, O_2^- is then the major negative charge carrier. In the present work, positive polarity is only investigated. Then, the electron density upstream of flame

base can be neglected and negative ions such as O_2^- are not likely to be formed. The only negatively charged species retained in the model will be the electrons.

Considering the previous simplifying hypotheses and definitions, the number of equations describing the charged species transport is reduced to two, one for H_3O^+ mass fraction (Y^i) which represents the positive charge density and one for the transport of electrons mass fraction (Y^e).

The ions and electrons term sources, $\dot{\omega}^i$ and $\dot{\omega}^e$ respectively, are determined via the Arrhenius law from reactions (A) and (C1). Following most studies [12,16,20,15], that are interested in the calculation of ions in flames, the rate of chemi-ionization (reaction A) is given by:

$$k_{\text{chemi-ionization}} = 2.512 \times 10^{11} \times e^{\left(\frac{-7118 \times 10^3}{R T}\right)} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

T is the temperature and R the universal gas constant.

Following Hu et al. [9] and Huckaby et al. [26], the global rate of positive ion recombination reaction with electrons retained in the calculations is the one measured by Peeters et al. [23]:

$$k_{\text{recombination}} = 1.144 \times 10^{17} \text{ cm}^3 \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

Since the integration of the GRI 3.0 detailed mechanism, imposes a very small time and spatial discretization, a tabulated approach of the neutral chemistry is employed. In this approach, the combustion involving neutral species is described with a tabulated chemistry accessed with two control parameters: the mixture fraction Z and a progress variable Y_c [27,28]. To construct the tabulation, a library of methane/air premixed flames with varying equivalence ratio generated with the program CHEMKIN the mechanism GRI 3.0 [21] is created. During the direct numerical simulation, species concentrations of neutral species and the heat release source term, \dot{Q} , are then directly extracted from the look-up table. The underlying assumption is that the charged species have no impact on the chemistry of neutral species. This can be justified by the very small molar concentration of charged species compared to the smallest molar concentration of neutral radical species implied in reactions A, B and C (CH, O, CO, OH and H). In all the simulations presented, the ratio of the concentration of H_3O^+ over the concentration of any of involved neutral radical is at maximum 0.015 for CH and lower than 1/10,000 for OH. These simplifications allow for describing the combustion chemistry involving neutral species by solving only two extra transport equations:

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Z}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) \quad (9)$$

$$\frac{\partial \rho Y_c}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y_c}{\partial x_j} \right) + \dot{\omega}_c \quad (10)$$

The progress variable is defined as: $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$ [29] and its source term is also obtained from the same look-up table $\dot{\omega}_c(Z, Y_c)$.

The set of Navier–Stokes equations in their fully compressible form are solved together with the Eqs. (9), (10) and one transport equation for each charged species considered (H_3O^+ and e^-). A fourth-order finite volume skew-symmetric-like scheme is adopted for the spatial derivatives [30] with third-order Runge Kutta explicit time stepping [31].

3. Evaluation of chemical kinetic model

Prior to the simulation of a lifted flame, a lean methane-oxygen and a lean methane-air 1D premixed flames studied, respectively, by Goodings et al. [32,33] and Wortberg [34], are calculated and used for the evaluation of the chemical mechanism described in the previous section. Experimental data concerning ion density in

flames are rather scarce in the literature. These two flames have been retained since quite detailed profiles of ions across the flame front are provided and also since both have been simulated by Prager et al. [20]. Then, the present kinetics model can be compared to both experimental and numerical estimations of ion density. In the absence of an external electric field, electric neutrality is imposed and only the transport equation for cation density is solved. The mesh spacing is around 0.0417 mm, this resolution is necessary to describe the profiles across the flame of CH and O the radicals primarily responsible of ions creation. The Fig. 1 presents the evolutions of CH and O concentrations, the temperature and the source term of H_3O^+ across the flame front for the lean methane-air flame (conditions of Wortberg [34]). All profiles are sufficiently resolved on the grid. The source term profile is first slightly negative (recombination) and then presents a peak of production followed by recombination in the burnt gases.

Fig. 2 compares the simulation results for the total positive ion concentration to experimental data [32,33] and numerical results [20] for a lean methane-oxygen flame. This flame has an equivalence ratio (ϕ) of 0.2 and burns at atmospheric pressure. The general shape of the profile as well as the maximum positive ion concentration and the ion profile width are consistent with the experiment. In our simulation, the maximum value corresponds to 1.27×10^{10} (cm^{-3}), which means a relative difference of 2.3% compared to the experimental value 1.3×10^{10} (cm^{-3}). The quality of our numerical results is superior to that of Prager et al. [20] who overestimated the maximum by 30%. This may be due to a better prediction of CH concentration by the detailed GRI mechanism than the one which can be obtained with a less detailed mechanism.

The flame of Wortberg [34] is calculated and compared (Fig. 3) to experimental and numerical [20] results. This flame is described by the following data: equivalence ratio $\phi = 0.513$, gas temperature at the burner mouth 402 K and atmospheric pressure. The present kinetics underestimates the peak in experimental ion concentration while the recombination in the burnt gases is fairly well captured. Prager et al. [20] obtained a peak of ion concentration which is higher than the present work but still underestimates the experimental one by 75%, meanwhile their predicted ion concentration toward the burnt gases is too small (Fig. 3). Nevertheless, the shape and the width of the ion profile is very similar in both the present work and the numerical results of Prager. The relative lack of

agreement for ionic density between the measurements and the simulations may be explained by the experimental technique which was based on an ionic current determination. Whereas the electronic characteristic of a probe is straightforward to interpret when used to obtain an electronic density, the analysis of ionic current for determining the corresponding density is rather complex. In the experiment from Wortberg, the wire of platinum-rhodium has a diameter of 100 μm and is likely to be at the flame temperature even if the catalytic recombination, frequently encountered on this kind of alloy, is neglected. For high temperatures, the probe does emit electrons and an electronic current adds itself to the expected ionic current. This may explain the large values of measured ionic species compared to the computed ones. The ion concentration measured by Goodings et al. has been obtained with mass spectrometry and is more likely to present a higher level of accuracy.

Overall, the present chemical kinetic mechanism successfully predicts the total density of ions in the lean methane-oxygen flame studied by Goodings [32,33], which presents the most complete experimental database present in the literature on the distribution of flame charged species. We may then conclude that the use of a tabulated chemistry for neutral species which provides input concentrations for cation production mechanism is a reasonable approach. Under the influence of an externally applied electric field, the charged species spatial repartition in the flame reaction zone will be modified. The assumption is made that neglecting the effect of charged species on neutral ones is still valid in this situation.

4. Results and discussion

4.1. Description of the lifted flame configuration

To gain understanding in the effect of an externally applied electric field on laminar diffusion flame stabilisation, a generic test-case has been designed, where the intensity of the applied potential and the velocity of the coflow can be easily varied. The configuration under study is a two-dimensional laminar diffusion methane/air flame in a slot burner, which is subjected to a DC electric field (Fig. 4). Three dimensional unstable modes, which have been observed experimentally [5,35,36], would not be reproduced by the simplified two-dimensional approach retained here. The

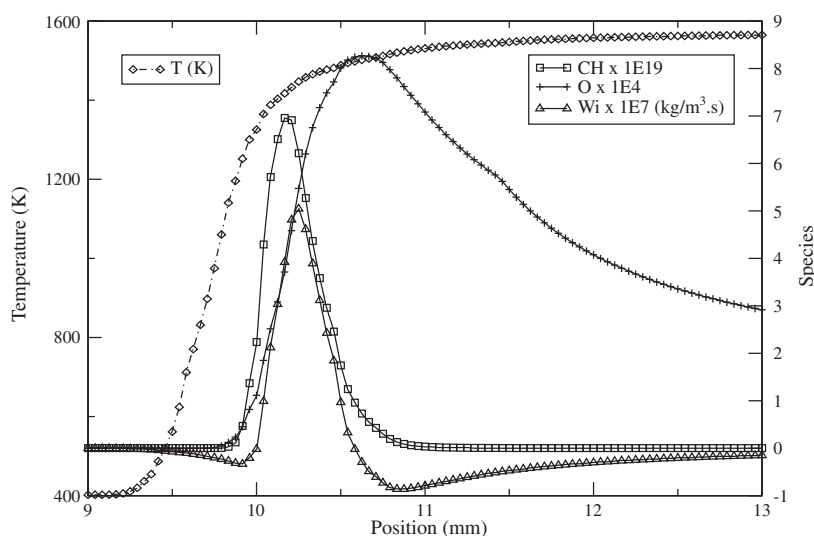


Fig. 1. Mole fractions of O and CH, H_3O^+ source term and temperature in the conditions of the experiment of Wortberg [34].

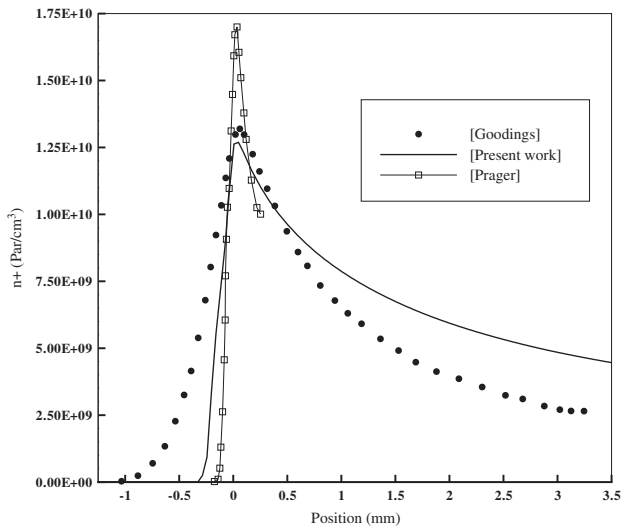


Fig. 2. Concentration of positive ions (line) in comparison to the experiment of Goodings et al. [33] (symbols) and to the simulation of Prager et al. [20] (line with symbols).

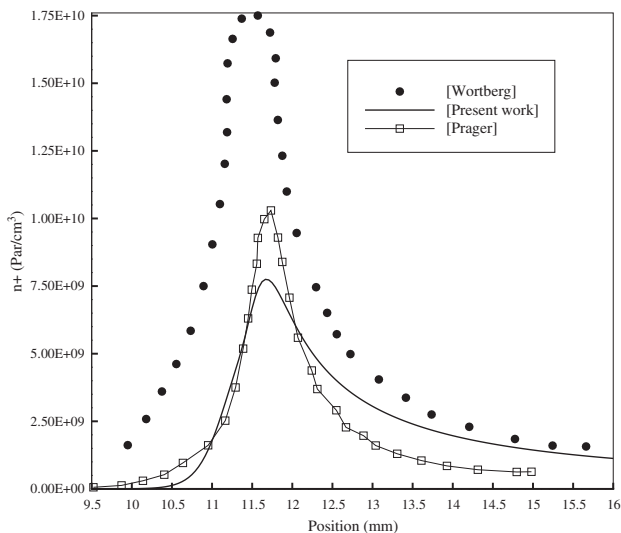


Fig. 3. Concentration of positive ions (line) in comparison to the experiment of Wortberg [34] (symbols) and to the simulation of Prager et al. [20] (line with symbols).

central methane jet (velocity: 6 m/s, diameter 2 mm) is surrounded by a co-flowing air jet (coflow velocity ranging from 0.75 to 2 m/s). A realistic burner lip of 0.1 mm width is also present since it is known to have a strong impact on flame stabilisation. The electric field is applied between two horizontal electrodes represented by a fine mesh grid that does not disturb the dynamics of the flow. The cathode is positioned at the burner level, while the anode is situated in the flame at the end of the solution domain (dimensions: 20 mm × 20 mm). The electric voltage V_0 is applied directly to the anode. This electric configuration is similar to the experimental set-up of Criner et al. [7]. In this experimental work, only one electrode is used, that was placed in the flame and raised to the voltage V_0 (the anode in our case). The environment and the electrically isolated ceramic burner play the role of the mass electrode, which is represented by the null-tension cathode in our con-

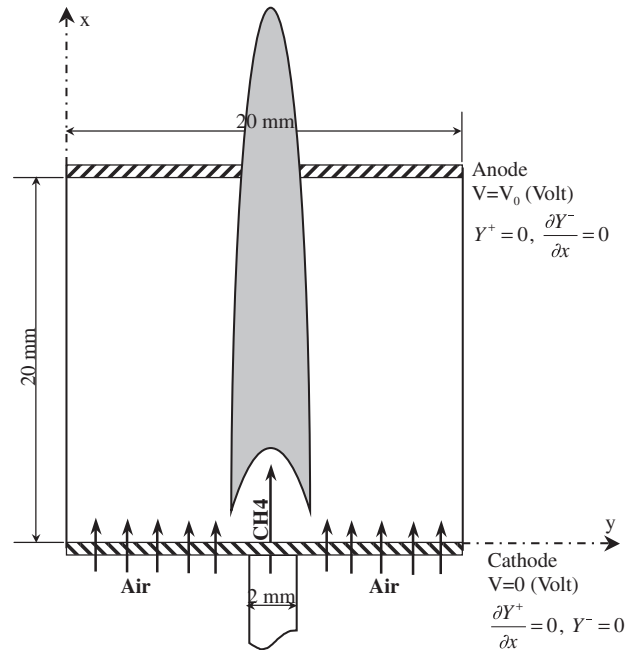


Fig. 4. Studied configuration.

figuration. V is equal to zero at the cathode ($x=0$) and takes a positive value V_0 at the anode ($x=L$) (Fig. 4). The mass fraction of electrons is supposed to be null at the cathode and its gradient is null at the anode. On the opposite, the mass fraction of cations is null at the anode and its gradient is null at the cathode. According to electricity principles, electrons are shifted in the inverse direction of positive ions and the electric field is directed from the anode to the cathode.

All simulations were conducted by considering an injection velocity of methane of 6 m/s. The analysis of the flame base stabilisation is first performed with a fixed coflow velocity of 0.75 m/s and different values of the applied potential (from 0 kV to 0.875 kV). In these simulations, the flame is in a first stage computed without the application of the electric field. The flame naturally stabilises at a height of 2.8 D (D being the diameter of fuel injection). This height is the reference position and the case without externally applied field and a coflow velocity of 0.75 m/s will be the reference configuration. Then, potentials of increasing strength are applied, the potential is always applied once the flame is located at its reference height.

The capacity of an applied electric field to prevent the blow-off of the flame has also been investigated. The coflow velocity is then increased up to 2 m/s by steps of 0.25 m/s from the reference value 0.75 m/s. Values of the coflow velocity above 1 m/s do not allow for a natural flame stabilisation, the flame gets blown off and the flame base withdraws. A potential is then applied and the minimum value of the potential which stops the blowing procedure is recorded.

Because of the significant velocity gradients near the gas inlet; a non-uniform mesh has been used with a clustering of the points in the vicinity of the injection. The solution dependence on the mesh size has been tested by considering an electric potential value equal to 0.5 kV applied to a stabilized flame. Two sizes of mesh have been considered 128^2 and 256^2 . The mesh resolution has no impact on the flame lift-off height, however to extract information on the velocity field ahead the flame, it is preferable to use a higher resolution, hence 256^2 has been retained in all the results presented. The mesh size is characterized by $\delta_x \sim 0.055$ mm and $\delta_y \sim 0.046$ mm in the vicinity of the flame base.

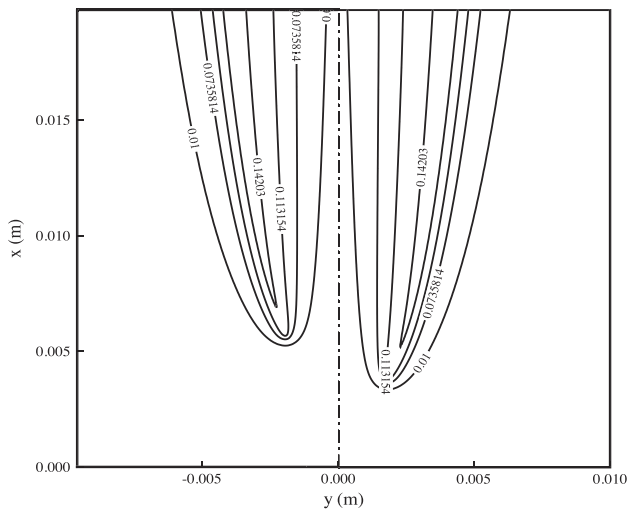


Fig. 5. Iso-progress variable before (left) and after applying a voltage of 0.625 kV (right).

4.2. Flame observed behaviour in the presence of an electric field

4.2.1. Impact on a stabilised flame of an external electric field

In a first stage, the air and methane velocities are fixed ($V_{CH_4} = 6$ m/s, $V_{air} = 0.75$ m/s) and only the applied potential is varied. As shown in Fig. 5, the behaviour of the flame is strongly influenced by the presence of the electric field. The stabilisation height, after applying a field of 0.625 kV, has decreased significantly and the flame tip is now located one burner diameter lower than without an applied voltage. The global shape of the flame appears unchanged by the application of the electric field, the flame being translated toward the burner. Since chemical effects of the charged species on neutral species is not present in the current model, only the ionic wind can be responsible for the observed behaviour of the flame.

The variation of the flame lift-off height with the applied voltage is presented in Fig. 6. This lift-off height is determined as the position, where the maximum heat release is reached. After a certain limit value of the potential difference (≈ 100 V), a decrease of the lift-off height with increasing applied voltage is observed.

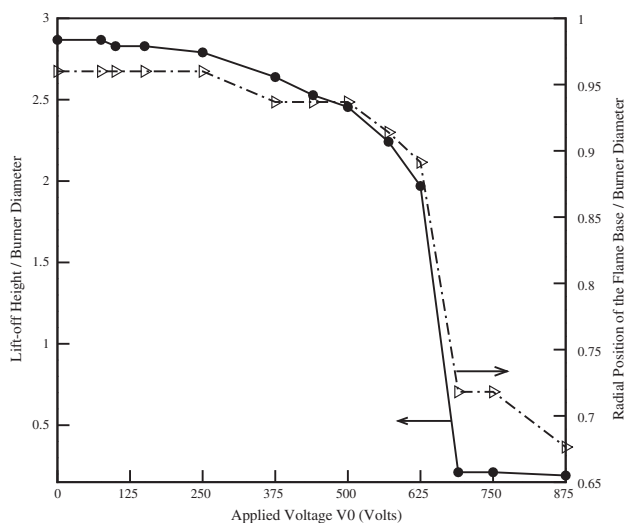


Fig. 6. Lift-off height and radial position of the flame base evolutions with the applied voltage.

When the voltage is smaller than 100 V, the modification brought to the momentum equation by the electric field is not sufficient to alter significantly the flow velocity. When the voltage is further increased, the lift-off height begins to diminish first slightly and, as the voltage is still increased, the diminution of lift-off height gets more and more pronounced.

These results present a common tendency with those from Criner et al. [7]. Actually, the increase of the applied electric voltage increases the electric force that controls the momentum transferred by ions to neutral species slowing down the main flow. Thus, raising this momentum allows the flame to propagate further downstream, as will be quantified in the next section. When the potential is larger than 0.690 kV the flame gets stabilised on the wake created by the burner lip. For values of potential smaller than 0.690 V, one may observe that the evolution of the lift-off height function of the applied potential is quasi-parabolic, so the lift-off height diminution is roughly proportional to the inverse of the square of the potential.

Fig. 6 shows also the evolution of the radial position of the flame base (determined as the point, where the heat release source term is maximum) with the applied voltage. As for the flame height, the radial position is first only slightly altered by the applied potential and as the potential is further increased the radial position decreases bringing the flame tip closer to the burner axis.

A close-up of the heat release source term at the flame base for various potentials is presented in Fig. 7. As the flame gets closer to the burner with an increased potential, the flame base stays on the stoichiometric line. Under the effect of the electric field, the flame is getting closer to the inlet travelling along the stoichiometric line. As this line gets closer to the burner axis with smaller axial positions, it is logical to find the flame tip radial location decreasing when the flame height is lowered. In Fig. 7, the flame tip orientation is also modified when travelling upstream, getting more and more bent toward the central axis.

The variation of the establishment time with the applied voltage is displayed in Fig. 8. This time corresponds to the time elapsed between the instant, where the potential is applied and the instant, where the flame has reached its new stabilised position. The establishment time for voltages below 0.675 kV (excepted for 0.5 kV) globally increases as the flame base covers a longer path (Fig. 6). For higher values, the establishment time decreases with the increase of the applied potential. When $V > 0.675$ kV, the flame position is only slightly modified by further increase of the potential (see Fig. 6), then the distance travelled by the flame remains the same. As the momentum transferred is higher for higher potentials, then for comparable distance the flame with a higher potential will travel faster toward the burner. The establishment time is of the order of 100 ms, this value is of the same order as that observed by Won et al. [37] between the two different times observed for a tribrachial flame to travel downstream with and without an externally applied potential of 6 kV with a 60 Hz frequency (coflow velocity: 0.46 cm/s, fuel jet velocity : 6.27 m/s). A time characteristic of the ion H_3O^+ motion between the tip of the flame and the cathode is given by Papac and Dunn-Rankin [11]: $t_i = L^2 / (\mu^2 V)$. For the applied potential of 625 V, $L = 4$ mm leading to $t_i \sim 0.2$ ms. This time is much smaller than the establishment time, which is linked to momentum transfer.

For all simulations whatever the imposed potential, the flame returns to its original position once the potential drop is set back to zero. This suggests that at the position, where the flame is stabilised, an equilibrium between the incoming flow momentum and the imposed electric forces is achieved.

4.2.2. Impact of the applied potential on blown flames

Of interest in burner design, is the possibility of the externally applied electric field to stabilise flames which would otherwise

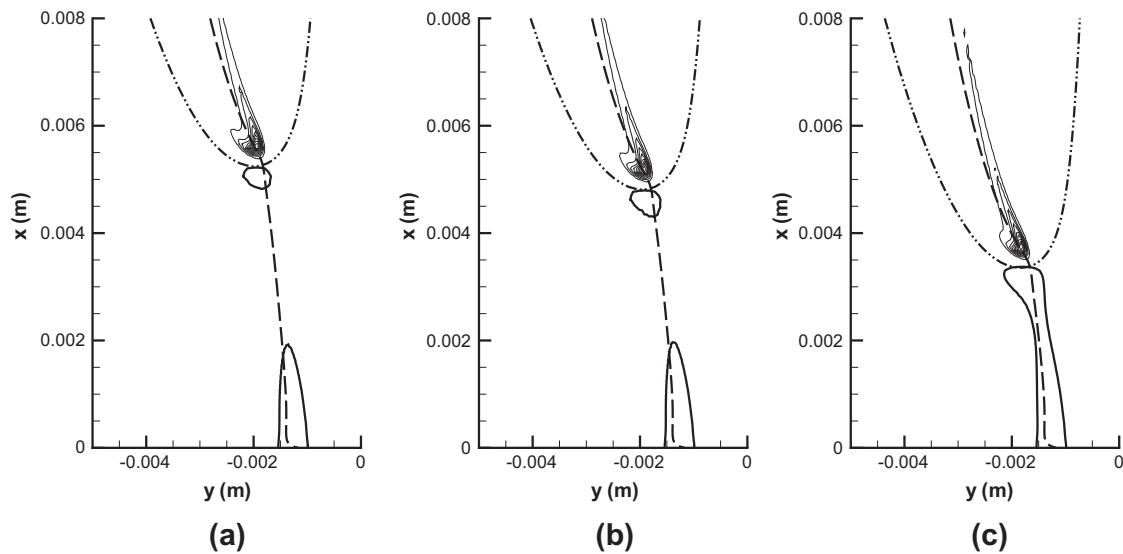


Fig. 7. Position of the flame with: (a) no applied potential, (b) 375 V and (c) 625 V. Thick line: $U = 0.38$ m/s, Dashed line: stoichiometric line, Dot dashed line: $Y_c = 0.005$, Thin line: heat release source term

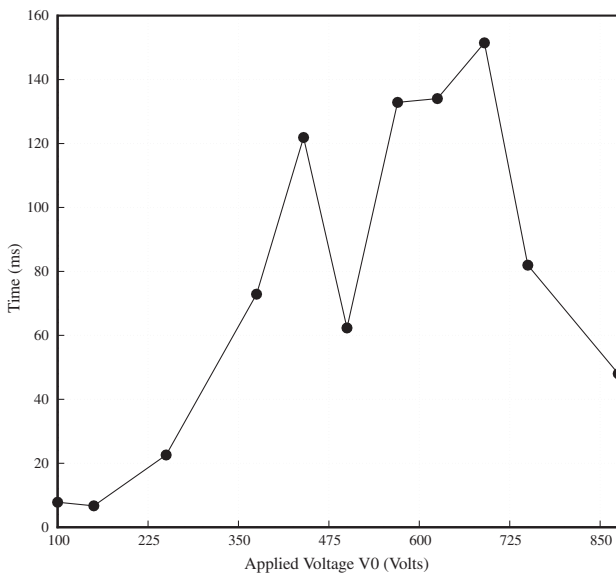


Fig. 8. Variation of the establishment time of the lift-off height, after the electric field application, with the applied voltage.

get blown off. Laminar lifted flames are highly sensitive to changes in the mass flow rates of the central jet or coflow, a slight increase of one of these velocities leading easily to the blowing out of the flame. In the studied configuration, the flame is blown off for coflow velocity larger than 0.95 m/s, which corresponds to 2.5 times the premixed planar stoichiometric flame velocity, $S_L^s = 0.38$ m/s for a methane/air mixture. Increasing the coflow velocity from this unity value, the minimum value of the potential to impose for stabilising the flame is sought. The procedure is the same for all the coflow velocities tested: (1) the flame is first stabilised with the reference test-case conditions, (2) the coflow velocity is increased up to a new target value (equal or over 1 m/s), (3) when the flame base is at an height of 10 mm (5 diameters), a potential is applied. The minimum or threshold value of the potential stopping the progression of the flame base further downstream is recorded. On

Fig. 9, the threshold value of the potential is plotted as a function of the coflow velocity. The relation between the two quantities is almost linear up to 2 m/s. Beyond that value, larger values of the potential could still ensure the stability of the flame. However, since the flame tip is equivalent to a point electrode, the potential is subjected to an upper limit. Indeed, for large enough potential values, a streamer discharge can occur between the flame tip and the cathode, which the present model cannot handle. In the present simulation, a coflow velocity as high as 5.2 times the premixed planar velocity or twice the coflow velocity of the reference test-case can be attained. Applying an electric potential has the ability to extend greatly the limit of stability of the flame, this conclusion is inline with the works from Won et al. [3] or Kim et al. [8].

It has also been noticed that if the potential is applied to the flame as its base reaches a higher position (ie 15 mm), its intensity

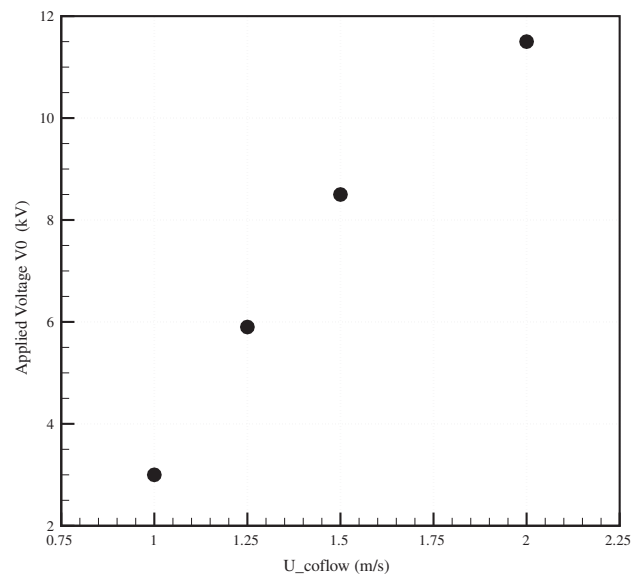


Fig. 9. Variation of the threshold value of the necessary voltage to improve the flame stabilisation with the coflow velocity.

has to be much higher. This implies that the important parameter controlling the intensity of the electric field is the distance between the flame base and the cathode.

4.3. Charged species distribution

The field of the charged species density, before and after applying 0.5 kV and 0.625 kV, is shown in Fig. 10. The positive ion concentration in close-to-stoichiometry flames of hydrocarbons, usually ranges from 10^{16} up to 10^{17} ions/m³ [2]. This order of magnitude is in good agreement with the present simulations.

Without an electric field (Fig. 10-center), the maximum concentration $\approx 2.9 \times 10^{17}$ m⁻³ is obtained at the base of the flame, where the heat release is maximum. The charged species are produced at the flame base, where the concentration of CH and O are maximum and then recombined in the trailing diffusion flame. After applying the electric field (Fig. 10-left,right), the maximum cation and electron concentrations get closer to the cathode. Meanwhile, the maximum values decrease as the spatial repartition gets wider. It is especially marked for electrons which are subjected to two opposed effects : the electric field tends to displace them toward the anode while they are created at the flame base which is attracted toward the cathode. It can be ex-

plained by the movement of ions and electrons as a result of the electric mobility.

The generally proposed explanation [1] for the flame displacement is that the electric field, according to its intensity, induces an acceleration of positive ions from the anode toward the cathode. These ions undergo collisions with neutral molecules and some of their momentum is transferred to these molecules slowing down the main flow. The ions are re-accelerated by the electric field after each collision, therefore, each ion is responsible for a large number of collisions. Due to the local decrease of the flow velocity, the flame encounters favourable local conditions to propagate further downstream reducing in the process its stabilisation height (Fig. 5). The electrons move in the opposite direction of the electric field (toward the anode) then the local neutrality of the gas is not respected anymore. The difference between positive and negative species concentrations normalised by the total concentration of charged species is shown in Fig. 13. The displacement of cations toward the cathode in front of the flame tip is clearly evidenced, the maximum value is found at the tip of the flame (indicated in the figure by the iso-line $Y_c = 0.005$). Small negative values are present in the burnt gases on the lean and rich sides away from the stoichiometric line. In these regions, the potential gradients are negligible and the resulting electric forces will have no impact. The electric

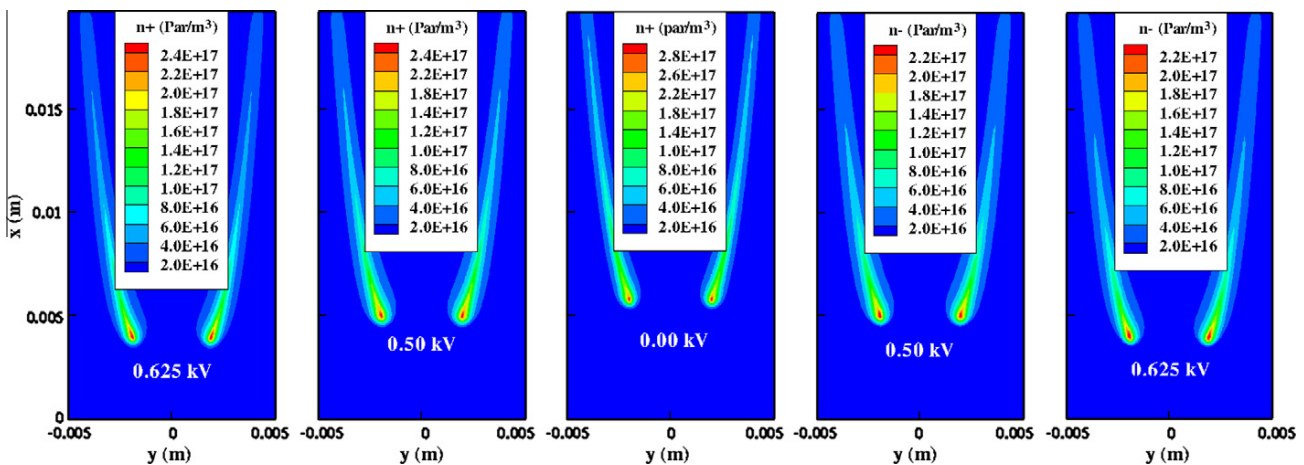


Fig. 10. The concentration repartition (part/m³) of : ions or electrons before the electric field application (center), ions (left) and (right) electrons after the application of the electric field.

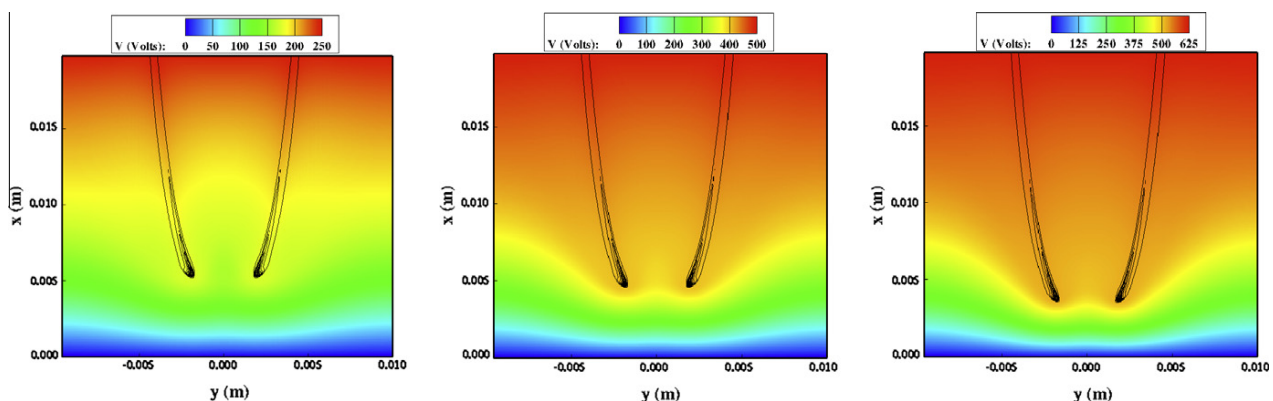


Fig. 11. Electric potential distribution for $V_0 =$ (left) 0.25 kV, (center) 0.5 kV and (right) 0.625 kV. Black lines: iso-contours of the heat release source term.

force field is expected to be maximum just at the tip of the flame, where significant charge separation and potential gradients are both present.

4.4. Electric field repartition

Fig. 11 shows the electric potential distribution for 0.25 kV, 0.5 kV and 0.625 kV. Two zones can be distinguished:

- (i) downstream of the flame tip, where the electric potential is maximum. This zone is nearly equi-potential with an electric potential close to that of the electrode V_0 . For all values of the potential, a sharp gradient in the region of the flame tip is observed,
- (ii) upstream of the flame tip, the potential falls abruptly to zero.

These trends are found in close agreement with the experimental observations of Criner et al. [7]. Then, the flame base behaves as an additional electrode of a tension of the same order as the applied voltage. The values of the potential extracted at the location, where the source term is maximum, are plotted in Fig. 12. For values of the applied potential V_0 less than 690 V, the potential at the flame tip is around $(V_0 - 100 \text{ V})$. However, for larger values when the flame tip is very close to cathode (see Fig. 6), the potential drops to values close to 300 V. The potential values obtained when the flame is very close to the cathode (<1 mm), may be questioned as the present model might be too simplified to describe quantitatively this interaction.

Fig. 14 displays the two components of the electric field intensity for different voltages. The electric field is negligible downstream of the flame base because of the quasi-equipotentiality of this area. As the electric potential drops sharply in the space situated between the flame base and the inlet plan, a strong axial electric field is induced which points in a direction opposed to the main direction of the flow, hence the negative sign of the axial component. The radial component of the electric field is weaker than the axial one. On Fig. 14-bottom a change of sign is observed when roughly crossing the stoichiometric line.

Close to the flame tip, the difference between ion and electron concentrations is significant and positive (Fig. 13); the resultant electric force in the axial direction is then opposed to the main direction of the flow (Fig. 15). In the meantime, the radial component (F_y) changes sign following the change of sign of E_y (Fig. 14-

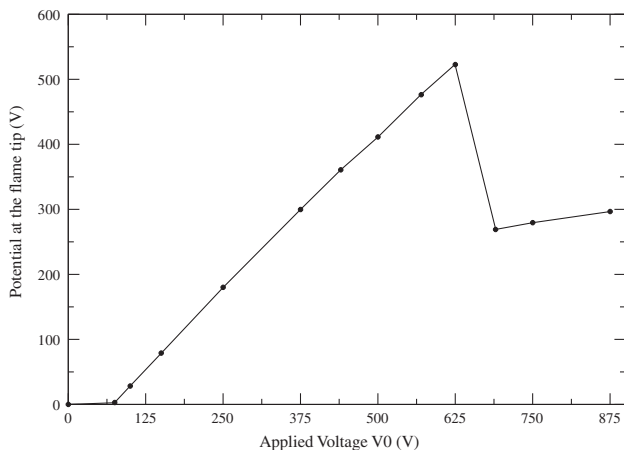


Fig. 12. Evolution of the potential extracted at the location of the maximum of the source term with the applied voltage.

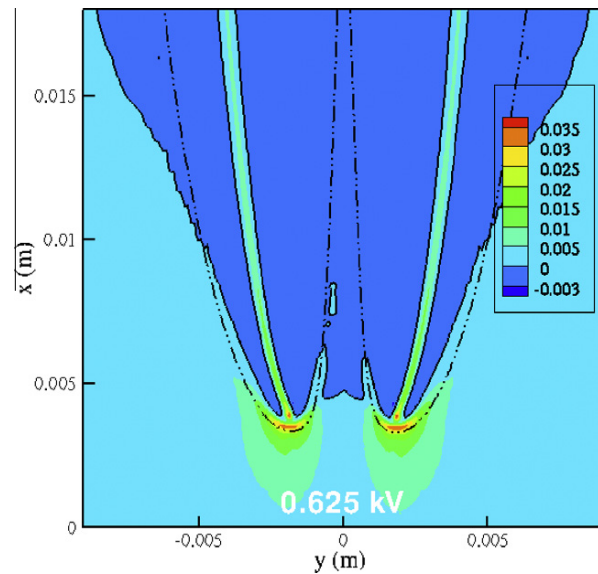


Fig. 13. Difference between the concentration repartition of cations and electrons normalised by $(n^i + n^e)_{max}$. $V_0 = 0.625 \text{ kV}$. Dashed line: $Y_c = 0.005$, thin line: $n^i - n^e = 0$.

bottom) when crossing the stoichiometric line. The resulting force field around the flame tip is roughly perpendicular to the flame envelope surface ($Y_c = 0.01$) and points in a direction opposed to the main flow. The electric force obliges the flow field to slow down ahead of the flame then favouring its upstream propagation and finally its anchoring.

4.5. The dynamics of the flow at the flame base

Numerous experimental studies and numerical studies [38–41] have evidenced the role of the propagative partially premixed flame edge in the stabilisation of lifted diffusion flames. The base of the flame is anchored in a region, where the equivalence ratio is stoichiometric and, where the flow velocity is of the order of the premixed flame propagation velocity. Further upstream, the velocity of the flow can be slightly higher, (see Fig. 5 of [41]). In the hypothesis of uniform velocity upstream of the flame and of large mixing thicknesses [41], the velocity, U_F , upstream of the triple flame which corresponds to the triple flame displacement speed is $\sqrt{\rho_u/\rho_b} S_L^s$. In the conditions of the present paper: $U_F = 2.5 \times S_L^s = 0.95$. This value corresponds to the maximum value of the coflow velocity that the flame, without the applied electric field, can stand before blowing off.

From Figs. 5, 7 and 11, it can be inferred that the global flame structure is not modified by the application of the electric potential but that the flame is merely translated upstream. On Fig. 7, it is observed that as the flame gets stabilised closer to burner, the source term distribution gets narrower, the wing of the triple flame on the lean side tending to disappear. This can be explained by the fact that as the flame gets closer to the injection, the gradients of the mixture field are stronger. To understand the mechanism leading to the upstream propagation of the flame, a detailed analysis of the dynamics of the flow at the flame base in the presence of an applied voltage has been carried out. In this context, the response of axial velocity component, U_x , of flow velocity, and of the flow velocity projected on the normal to the flame, U_n , front have been recorded.

The velocities are extracted on the stoichiometric line just ahead of the maximum of the heat release at a location, where the mass fraction of the progress variable is equal to 0.005. Fig. 7

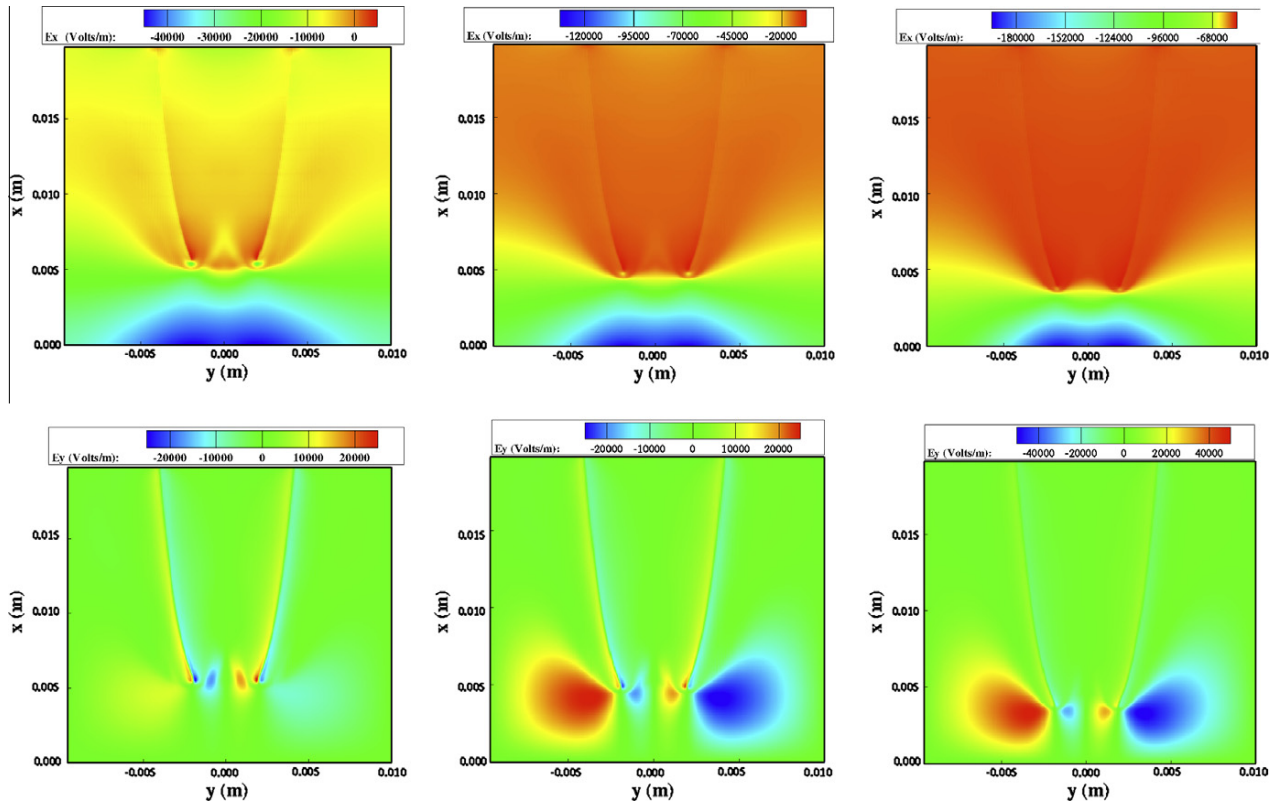


Fig. 14. Electric field distribution for $V_0 =$: (left) 0.25 kV, (center) 0.5 kV and (right) 0.625 kV. Top: axial component, Bottom: radial component.

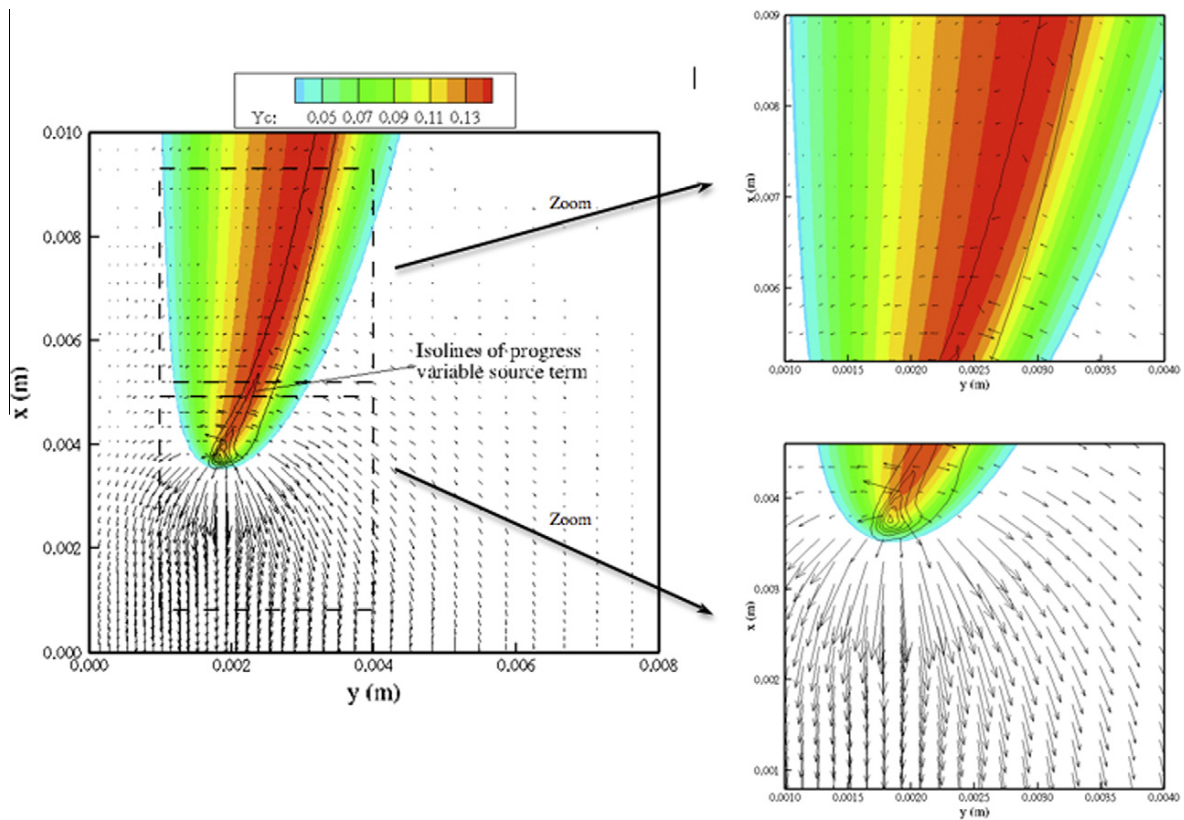


Fig. 15. Electric force vectors for $V_0 = 0.625$ kV.

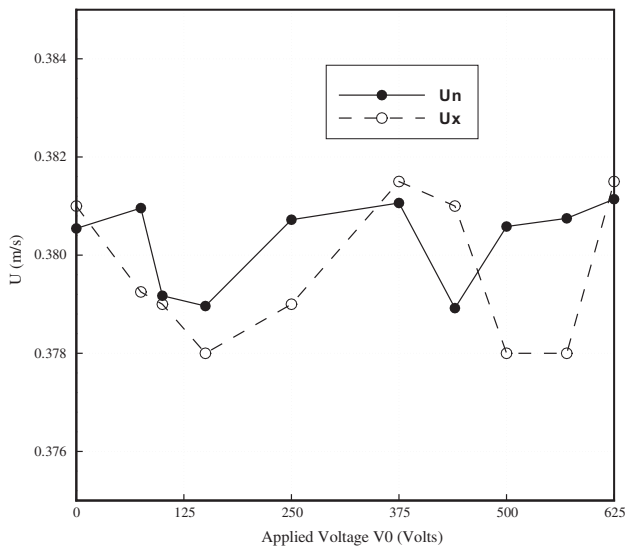


Fig. 16. Variation with applied voltage of the axial velocity (U_x) and of the velocity projected on the normal to the flame front (U_n), both extracted at the flame base.

allows for observing the intersection of the two iso-lines for different lift-off heights. The iso-velocity corresponding to S_L^s is also indicated. It is found that for all cases the axial velocity just ahead of the flame base is very close to the stoichiometric planar premixed flame propagation speed. Fig. 16 illustrates the variation of U_x and U_n with the applied voltage once the flame base has reached its stabilisation location. Whatever the applied voltage, both velocities at the flame base stays within 0.5% of the value of S_L^s . For high values of the potential (>400 V) and as expected from the previously cited studies on triple flame stabilisation, the velocity projected on the direction normal to the flame front stays even closer to the one-dimensional premixed flame propagation speed (Fig. 16) than does the axial one. This is linked to the fact that the flame orientation is modified when getting close to the injection and the difference between normal to the flame front and axial velocities becomes more pronounced.

The same velocities axial and projected on the normal to the flame front, just ahead of the flame, have been recorded during the propagation upstream of the flame base after the application of a potential of 0.5 kV. The temporal evolution in Fig. 17-a shows a sharp decrease of the axial velocity at the flame tip just after the electric field application. But after some time, the axial velocity increases again until it stabilizes at a value around 0.38 m/s, once the flame has reached its new stabilisation position. In the presence of the externally applied electric field, the ions exit the flame front and exchange their momentum with the incoming flow slowing it down below the stoichiometric flame velocity. The flame finds favourable conditions to propagate a bit further upstream. In the meantime new cations are continuously produced by combustion and are exiting the flame front slowing down the fluid motion and paving the way for the propagation of the flame base further downstream. As the flame is displaced toward the injector, the velocity encountered by cations around the stoichiometric line gets higher. The effect of the ionic wind becomes insufficient to slow down the fluid velocity below S_L^s and an equilibrium position is reached. This evolution is even clearer for the projected velocity, U_n (Fig. 17b), as the flame base propagates slightly bent toward the burner axis (Fig. 11).

To further evidence the impact of the electric body forces on the flow velocity ahead of the flame, the magnitude of the velocity at the flame base (u_{up}) has been extracted when the flame is receding under the influence of an increased coflow velocity (see Section 4.2.2) at four axial positions. The velocity (u_d) is then extracted, at the flame base and for the same spatial positions, when the flame is progressing again upstream under the influence of the applied potential. For each coflow velocity and corresponding applied potential (see Fig. 9), the difference between the two values of the velocity magnitude at the flame base ($u_{up} - u_d$), for four lift-off heights, is plotted in Fig. 18. As u_{up} and u_d are extracted at the flame base for identical axial positions, their difference gives an estimation of the effect of the ion-driven wind on the velocity field independently of the effect of the flame itself on this field (the possible impact of the change of radial position can be neglected). The difference of the velocity magnitudes is found essentially dependent upon the applied potential with an almost linear relationship. However, as the applied potential gets stronger the dispersion between the velocity magnitudes tends to increase for

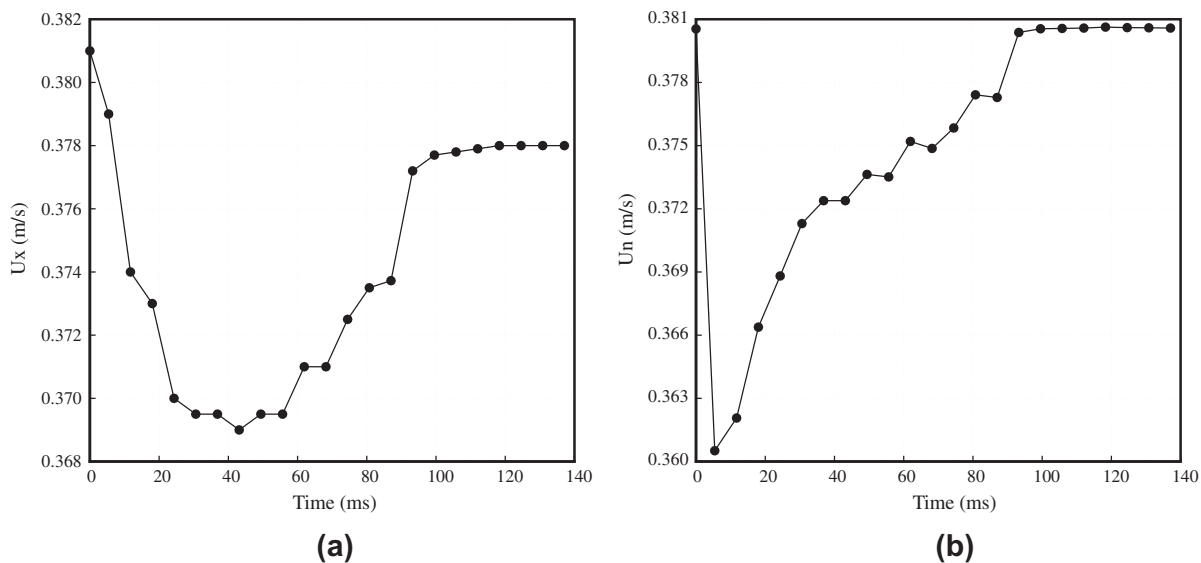


Fig. 17. Temporal evolution of: (a) the axial velocity (U_x) and (b) the velocity projected on the normal to flame front (U_n), both extracted at the flame base, for $V_0 = 0.5$ kV.

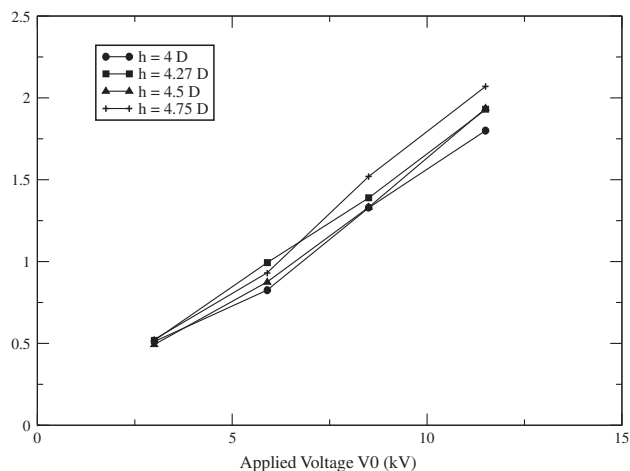


Fig. 18. Difference for an identical coflow velocity of the velocity magnitudes at the flame base ($u_{up} - u_t$) obtained with and without applied potential for different heights. The value of the potential corresponds to the minimum value which has to be applied to stop the blowing of the flame for a given coflow velocity (case of the Section 4.2.2).

different axial positions. The change of velocity goes to up 2 m/s for $V_0 = 10$ kV showing a significant effect of the ion-driven wind to slow down the flow.

Overall, the present analysis is inline with the result of Lee and Chung [42], who have ascribed the phenomenon of lifted flame reattachment to a balance mechanism between flow velocity and the propagation speed of a tribrachial flame in laminar jets.

5. Perspectives

A simple model to represent the effect of an external electric field on flame stabilisation has been proposed. The approach retained for the chemistry, coupling a detailed tabulated chemistry for the neutral species and a simplified mechanism for charged species, recovers a correct ionic density. The simulations of lifted diffusion flames have shown that the presence of the electric field improves the flame stabilisation and qualitatively, observations made by several authors in similar configuration are retrieved. Since the model accounts only for the effect of the ionic wind, one may conclude that the ion-driven wind alone can improve the flame stability.

Further developments of the model can be envisaged. For instance, transporting the species instead of using a tabulated approach would allow for including the effects of the gradient of the equivalence ratio which are also important in flame stabilisation. Another possibility is to employ a tabulated chemistry approach including the contribution of mixture fraction gradient [43]. The expressions of the mobilities have probably an important impact on the answer of the flame to the electric field. The constant value assumption used in this paper can certainly be discussed and using relations accounting for the mixture composition and temperature would be an improvement. The influence of negative ions

will also need to be investigated especially when a reversed potential is applied.

Acknowledgements

This work was performed using HPC resources from GENCI-IDRIS (Grant 2009-0152) and from Centre Régional Informatique de HAute-Normandie (CRIHAN).

References

- [1] J. Lawton, F.J. Weinberg, *Electrical Aspects of Combustion*, Clarendon Press, Oxford, 1969.
- [2] A.B. Fialkov, *Prog. Energy Combust. Sci.* 23 (1997) 399–528.
- [3] S.H. Won, M.S. Cha, C.S. Park, S.H. Chung, *Proc. Combust. Inst.* 31 (2007) 963–970.
- [4] A. Sakhrieh, G. Lins, F. Dinkelacker, T. Hammer, A. Leipertz, D.W. Branton, *Combust. Flame* 143 (2005) 313–322.
- [5] J. Vinogradov, E. Sher, I. Rutkevich, M. Mond, *Combust. Flame* 127 (2001) 2041–2050.
- [6] S.M. Lee, C.S. Park, M. S. Cha, S.H. Chung, *IEEE Trans. Plasma Sci.* 33 (2005) 1703–1709.
- [7] K. Criner, PhD thesis, Rouen University, France, 2008.
- [8] M.K. Kim, S.K. Ryu, S.H. Won, S.H. Chung, *Combust. Flame* 157 (2010) 17–24.
- [9] J. Hu, B. Rivin, E. Sher, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 21 (2000) 124–133.
- [10] K.E. Ulybyshev, *Trans. Izv. Ros. Akad. Nauk, Mekh. Zhidkosti I Gazan, Moscow* 1 (2000) 48–53.
- [11] M.J. Papac, D. Dunn-Rankin, *Combust. Theory Modell.* 12 (2008) 23–44.
- [12] K. Yamashita, S. Karnani, D. Dunn-Rankin, *Combust. Flame* 156 (2009) 1227–1233.
- [13] H.C. Jagers, A. Von Engel, *Combust. Flame* 16 (1971) 275–285.
- [14] K.G. Payne, F.J. Weinberg, *Proc. Roy. Soc. Lond., Ser. A. Math. Phys. Sci.* 16 (1958) 316–339.
- [15] T. Pedersen, R. Brown, *Combust. Flame* 94 (1993) 433–448.
- [16] R.C. Brown, A.N. Eraslan, *Combust. Flame* 73 (1988) 1–21.
- [17] J.L. Delcroix, *Physique des Plasmas, Monographies DUNOD*, 1963.
- [18] M.J. Papac, D. Dunn-Rankin, *Ann. NY Acad. Sci.* 1077 (2006) 585–601.
- [19] A.M. Starik, N.S. Titova, *Combust. Explo. Shock Waves* 38 (2002) 253–268.
- [20] J. Prager, U. Riedel, J. Warnatz, *Proc. Combust. Inst.* 31 (2007) 1129–1137.
- [21] M. Frenklach, T. Bowman, G. Smith, B. Gardiner. <<http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>>.
- [22] H.F. Calcote, *Combust. Flame* 1 (1957) 385–403.
- [23] J. Peeters, C. Vinckier, A. Van Tiggelen, *Oxid. Combust. Rev.* 4 (1969) 93–132.
- [24] H.F. Calcote, S.C. Kurzius, W.J. Miller, *Proc. Combust. Inst.* 1 (1965) 605.
- [25] I.A. Kossyi, A.Y. Kostinsky, A.A. Matveyev, V.P. Silakov, *Plasma Sources Sci. Technol.* 1 (1992) 207.
- [26] E.D. Huckaby, B. Chorpeneing, J. Thornton. In: *US Combustion Meeting*, 2007.
- [27] O. Gicquel, N. Darabiha, D. Thevenin, *Proc. Combust. Inst.* 28 (2000) 1901–1908.
- [28] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, N. Darabiha, *Combust. Flame* 140 (2005) 147–160.
- [29] P. Domingo, L. Vervisch, D. Veynante, *Combust. Flame* 152 (2008) 415–432.
- [30] F. Ducros, F. Laporte, T. Soulères, V. Guinot, P. Moinat, B. Caruelle, *J. Comput. Phys.* 161 (2000) 114–139.
- [31] S. Gottlieb, C.W. Shu, *Math. Comput.* 67 (1998) 73–85.
- [32] J.M. Goodings, D.K. Bohme, T.M. Sugden, *Proc. Combust. Inst.* 16 (1977) 891–902.
- [33] J.M. Goodings, D.K. Bohme, Chun-Wai Ng, *Combust. Flame* 36 (1979) 45–62.
- [34] G. Wortberg, *Proc. Combust. Inst.* 10 (1965) 651–655.
- [35] S.D. Marcum, B.N. Ganguly, *Combust. Flame* 143 (2005) 27–36.
- [36] D.L. Wisman, S.D. Marcum, B.N. Ganguly, *AIAA* 143 (2005) 27–36 [2007–1383].
- [37] S.H. Won, S.K. Ryu, M.K. Kim, M.S. Cha, S.H. Chung, *Combust. Flame* 152 (2008) 496–506.
- [38] S. Ghosal, L. Vervisch, *Combust. Flame* 124 (2001) 646–655.
- [39] K.A. Watson, K.M. Lyons, J.M. Donbar, C.D. Carter, *Combust. Flame* 119 (1999) 199–202.
- [40] L. Muniz, M.G. Mungal, *Combust. Flame* 111 (1997) 16–30.
- [41] G.R. Ruetsch, L. Vervisch, A. Linan, *Phys. Fluids* 6 (1995) 1447–1454.
- [42] J. Lee, S.H. Chung, *Combust. Flame* 127 (2001) 2194–2204.
- [43] P.D. Nguyen, L. Vervisch, S. Vallinayagam, P. Domingo, *Combust. Flame* 157 (2010) 43–61.

Dans de nombreux travaux de la littérature, les champs électriques apparaissent comme une solution prometteuse pour assister la combustion, en particulier la stabilisation des flammes. Néanmoins, il est difficile de conclure sur les propriétés des champs électriques utiles à l'amélioration de la combustion, du fait de la disparité des résultats, en particulier concernant la polarité du champ appliqué. Il est également difficile de tirer des conclusions sur quel est le phénomène physique clé responsable de l'amélioration de la stabilisation. La simulation numérique peut être une approche utile pour répondre à ces diverses questions. A ce sujet, un modèle mathématique permettant de modéliser la combustion en présence d'un champ électrique a été développé. Les équations de l'aérothermochimie sont couplées à des équations de bilan pour les densités des espèces chargées, et une équation de Poisson pour le potentiel électrique est résolue. Une situation principale est étudiée pendant la thèse ; elle concerne la stabilisation de flammes de diffusion par application d'un champ électrique continu ou alternatif. Les résultats obtenus montrent que la présence du champ électrique améliore significativement la stabilisation de la flamme. L'ampleur de cette amélioration dépend de l'intensité et de la polarité de la tension appliquée. Si la tension appliquée est alternative, un facteur supplémentaire s'ajoute pour influencer la stabilisation ; il s'agit de la fréquence. Une interprétation des mécanismes permettant la stabilisation est proposée.

Mots clés : Modélisation numérique, Stabilité de flammes, Champ électrique.

In various experimental works of literature, the electric field appears as a promising solution to assist combustion stabilization. However, because of the disparities among results, especially about the polarity of the applied electric field, it is difficult to conclude on what are the useful properties of the electric field for stabilization improvement. Also, it is difficult to draw conclusions on what is the key physical phenomenon responsible for stabilization improvement. Numerical simulation of a flame submitted to an electric field is a valuable approach for achieving these goals. In this regard, a mathematical approach to model combustion in the presence of an electric field was developed. The Navier-Stokes equations along with transport equations for charged species and the electric potential Poisson's equation are solved. A main situation, that concerns the stabilization of diffusion flames by applying a direct or alternating electric field, is studied. The results show that the presence of the electric field improves the flame stabilization. The magnitude of this improvement depends on the intensity and polarity of the applied voltage. If the applied voltage is alternating, an additional factor, which is the frequency of the electric current, influences also the extent of the flame stabilization improvement. An interpretation of the stabilization mechanisms is proposed.

Keywords : Numerical modeling, Flame stability, Electric field.