



HAL
open science

Analyses théorique, numérique et expérimentale de la détermination de la vitesse de combustion laminaire à partir de flammes en expansion sphériques

Alexandre Lefebvre

► **To cite this version:**

Alexandre Lefebvre. Analyses théorique, numérique et expérimentale de la détermination de la vitesse de combustion laminaire à partir de flammes en expansion sphériques. Physique [physics]. INSA de Rouen, 2016. Français. NNT : 2016ISAM0009 . tel-01429840

HAL Id: tel-01429840

<https://theses.hal.science/tel-01429840v1>

Submitted on 9 Jan 2017

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.



Normandie Université

THESE

Pour obtenir le diplôme de doctorat

Spécialité Physique & Energétique

**Préparée au sein de l'INSA de Rouen et des laboratoires CORIA UMR-6614, Rouen
et PRISME UPRES-4229, Orléans**

**Analyses théorique, numérique et expérimentale
de la détermination de la vitesse de combustion laminaire
à partir de flammes en expansion sphériques**

**Présentée et soutenue par
Alexandre LEFEBVRE**

**Thèse soutenue publiquement le 11 / 05 / 2016
devant le jury composé de**

Mme Nabiha CHAUMEIX	Directeur de recherche CNRS, ICARE	Rapporteur
M. Julien SOTTON	Professeur ENSMA, PPRIME	Rapporteur
M. Laurent SELLE	Chargé de recherche, IMFT	Examineur
Mme Cécile PERA	Docteur ingénieur, Infineum	Examineur
M. Guillaume DAYMA	Professeur, Université d'Orléans, ICARE	Examineur
M. Vincent MOUREAU	Chargé de recherche CNRS, CORIA	Invité
M. Emilien VAREA	Maître de conférences, Université de Rouen, CORIA	Invité
M. Bruno RENOU	Professeur, INSA de Rouen, CORIA	Directeur
M. Fabien HALTER	Professeur, Université d'Orléans, ICARE	Co-directeur
M. Vincent MODICA	Maître de conférences, Université de Rouen, CORIA	Co-encadrant

Thèse

Présenté par :

Alexandre Lefebvre

En vue de l'obtention du grade de :

Docteur de la Normandie Université,

délivré par l'**Institut National des Sciences Appliquées de Rouen**

Discipline : Physique
Specialité : Energétique
Laboratoires d'accueil : CORIA CNRS UMR-6614, Rouen
PRISME UPRES-4229, Orléans
Ecole doctorale : SPMII

**Analyses théorique, numérique et expérimentale de la
détermination de la vitesse de combustion laminaire à partir
de flammes en expansion sphériques**

Soutenue le 11 . 05 . 2016

Devant le jury composé de :

N. Chaumeix	Directrice de recherche CNRS, ICARE	Rapporteur
J. Sotton	Professeur, ENSMA, Institut PPRIME	Rapporteur
L. Selle	Chargé de recherche, IMFT	Examineur
C. Pera	Docteur ingénieur, Infineum	Examineur
G. Dayma	Professeur, Université d'Orléans, ICARE	Examineur
V. Moureau	Chargé de recherche CNRS, CORIA	Invité
E. Varea	Maître de Conférences, Université de Rouen, CORIA	Invité
B. Renou	Professeur, INSA de Rouen, CORIA	Directeur
F. Halter	Professeur, Université d'Orléans, ICARE	Co-directeur
V. Modica	Maître de Conférences, Université de Rouen, CORIA	Co-encadrant

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé en co-tutelle au sein de l'équipe combustion expérimentale du groupe écoulements réactifs de l'UMR 6614-CORIA et du groupe de combustion expérimentale du laboratoire PRISME UPRES-4229 d'octobre 2012 à avril 2016.

Je tiens tout d'abord à remercier l'ensemble des membres du jury : N. Chaumeix, J. Sotton, L. Selle, C. Pera, G. Dayma, V. Moureau, et E. Varea pour avoir accepté d'examiner mes travaux de thèse. J'adresse aussi tous mes remerciements à mes encadrants : Bruno Renou, Fabien Halter et Vincent Modica pour m'avoir accordé leur confiance et m'avoir soutenu tout au long de ces travaux, que ce soit moralement, techniquement ou scientifiquement.

Je remercie toutes les personnes qui m'ont permis, de près comme de loin, de déjouer toutes les embûches de la thèse durant ces trois dernières années. Elles sont très nombreuses, aussi bien à Rouen qu'à Orléans, mais méritent d'être citées ici.¹

Tout d'abord, toutes les personnes rencontrées au cours de ces années aux laboratoires CORIA, PRISMES et ICARE : Ben (le ch-ti) & Caro, Ju (le 9-3 de Miami), les Godin/Godet, le cartel sud-américain de la science, Léa (ma partenaire d'études), Abou, Julien, Louise, Thom & Edouard (les rally-men), Erwan (le breton), Yi (y'a pas le choix), Javier, Hakim, Charles, les Pierrot, JB, Kevin, Kouame, Jorris, les Romains et tant d'autres.

J'adresse une pensée particulière pour mes collègues de bureau : Pradipos (le pakistanais), Junior (l'éternel doctorant et mon colloque), la Cardin (Mme l'institut), Carlos (la planche pou....) et tous ceux qui ont participé à l'aventure A2DoC ces trois dernières années : Petit Fred, Thomas, Marcos, Lila, Nath... Et une pensée encore plus particulière pour les "anciens" du PMU qui m'ont intronisé parmi eux : Père Grout & la comtesse de Mesnières, Pool & Mool, la famille Gazon, Nicov & Mélie.

Je remercie aussi l'ensemble du personnel du CORIA où j'ai passé la plus grande partie de ma thèse. A l'atelier : Titi, Phiphi, Jack, Ben, Nono, Antoine, Papa ; à l'administration : Val, Chrichri (Mme bonbons), Flo, Amandine, Isa, Shirley, El magnifico et tous les autres ; au service informatique : Céd, Guillaume, Alexis ; au pôle métrologie : Gillou, Carole, Alexis, Francky,

1. Comme à mon habitude, j'espère n'avoir oublié personne dans cette liste

Saïd ; et au bâtiment : Stéphane, Henri. Je n'oublie pas pour autant ceux qui m'ont accueilli à Orléans : Bruno, Fabrice et Christine. Vous avez tous participé à ce travail par votre présence, votre aide et tous les moments de joie que vous savez si bien créer autour d'un café, d'un barbecue ou en dehors du labo.

Une petite pensée aussi à mes anciens enseignants avec lesquels j'ai fait mes premiers pas vers le monde scientifique : Mr Champot, Mme Pénard, Mr Haddadi, Mme Biot, Mr Gavoury et tous les autres.

Merci aussi à Shozo K., Soichiro H., Torakusu Y., Hisatake S. et Grover J. pour avoir construit les outils de ma relaxation dominicale.

Enfin, je termine en adressant un immense merci à l'ensemble de ma famille.

Résumé

Les enjeux environnementaux et sociétaux de la combustion de combustibles fossiles pour la production d'énergie (électrique, chauffage ou transport), nécessitent le développement de nouveaux modes de combustion, de nouvelles technologies de brûleurs et de combustibles alternatifs (gazéification de la biomasse, biofuels, ...). La vitesse de combustion laminaire est un des paramètres fondamentaux utilisé pour caractériser la combustion pré-mélangée de ces nouveaux mélanges combustibles. Cette vitesse est une donnée de référence pour le processus de validation et d'amélioration des schémas cinétiques ainsi qu'un paramètre d'entrée pour estimer la vitesse de combustion turbulente de la plupart des codes de combustion turbulente. Mais bien qu'étudiée depuis plus de 100 ans, la détermination expérimentale précise de cette vitesse reste encore un défi de par les limitations inhérentes aux configurations expérimentales utilisées, en particulier pour les conditions de pression et de température élevées.

Dans ce contexte, les objectifs de ces travaux de thèse concernent l'étude, l'analyse et la caractérisation des techniques de détermination de la vitesse de combustion laminaire à partir des flammes en expansion sphérique, en proposant une réflexion sur la minimisation de l'ensemble des sources d'incertitudes possibles sur la détermination de cette vitesse. Cette approche est réalisée pour la configuration de flamme en expansion sphérique, permettant des températures et pressions élevées et maîtrisées.

Dans une première partie, le formalisme des définitions des vitesses de flamme laminaire existantes dans cette configuration est rappelé afin de définir les facteurs d'incertitudes liés à la mesure expérimentale de ces vitesses (grandeurs cinématiques locales et cinétique globale). En particulier, les effets liés à l'estimation de l'état thermodynamique des gaz brûlés, du rayonnement et de la diffusion différentielle sont discutés. Dans une seconde partie, plusieurs dispositifs numériques et expérimentaux utilisés au cours de cette thèse et permettant l'étude de flammes sphériques en expansion sont présentés. Une étude utilisant quatre dispositifs expérimentaux différents est proposée afin d'analyser et caractériser les incertitudes inhérentes aux mesures et à leur traitement. Enfin dans une troisième partie, une définition rigoureuse de la vitesse de consommation est proposée et une nouvelle méthodologie pour la mesurer est

développée. Une validation numérique complète est présentée. Puis les incertitudes liées aux rayonnement, à la diffusion différentielle et à l'extrapolation des données mesurées sont étudiées en détails. Cette dernière étape introduit un biais qui peut être conséquent, et une nouvelle méthodologie pour exploiter des mesures brutes est proposée par une comparaison directe avec des simulations DNS reproduisant les expériences.

Mots clés : Vitesse de combustion laminaire, vitesse de consommation, flamme sphérique, longueurs de Markstein, incertitude

Abstract

Environmental and social challenges concerning the combustion of fossil fuels for energy production (electricity, building and transport) require the development of new combustion processes, new burner technologies and alternative fuels (gasification of biomass, biofuels, . . .). Laminar burning velocity is one of the fundamental parameters used to characterize premixed combustion for these new fuels. This speed is a reference for the validation and improvement of kinetic schemes and an input parameter to estimate the turbulent burning velocity of most turbulent combustion codes. But even if it has been studied over 100 years, the precise experimental measurement of this velocity is still complicated due to inherent limitations in experimental configurations used, especially for high pressure and temperature conditions.

In this context, this thesis work focuses on the study, analysis and characterization of the different techniques used to determine the laminar burning velocity from spherically expanding flames and proposes a reflection on the minimization of all possible uncertainty sources. This approach is achieved with confined spherical flames which allow to obtain high temperature and pressure initial conditions.

In the first part, the formalism of existing laminar flame speeds in spherical expanding configuration is reminded to define the factors of uncertainty related to the experimental measurement (local kinematic and global kinetic variables). In particular, the effects associated with the estimation of the burned gases thermodynamic state, radiation and differential diffusion are discussed. In the second part, several numerical and experimental devices used in this thesis are presented. A study on four different experimental setups is proposed to analyze and characterize the uncertainties in the measurements and processing. Finally, in the third part, a rigorous definition of the consumption speed is proposed and a new methodology to measure it is developed. A complete validation based on numerical results is presented. Then uncertainties related to radiation, differential diffusion and extrapolation to zero stretch rate of measured data are detailed. This last step introduces a non-negligible bias and a new methodology to exploit raw data by a direct comparison with DNS reproducing the experiments is proposed.

Key words : Laminar burning velocity, consumption speed, spherical flames, Markstein length, uncertainties

Table des matières

Résumé	vii
Abstract	viii
Nomenclature	xv
1 Introduction	1
1.1 Introduction et motivation de cette étude	1
1.2 Organisation du mémoire	6
Partie I Aspects théoriques des flammes laminaires de prémélange	9
2 Flamme laminaire idéale de prémélange 1D plane non étirée	11
2.1 Définition générale d'une flamme de prémélange	12
2.2 Les équations de conservation	14
2.3 Les équations de la chimie	15
2.4 Structure d'une flamme 1D plane non étirée	16
2.4.1 Définition de l'épaisseur de flamme	18
2.4.2 L'hypothèse de flamme infiniment mince	19
2.5 La vitesse de combustion laminaire	20
2.5.1 Définition d'une vitesse globale	20
2.5.2 Relation avec des paramètres cinématiques locaux de la flamme	22
2.6 Conclusion et intérêt de la configuration idéale 1D plane adiabatique non étirée .	24
3 Flamme réelle de prémélange en expansion sphérique libre	27
3.1 Choix de la configuration	29

3.2	L'étirement du front de flamme	33
3.2.1	Définition générale	33
3.2.2	Expression en configuration SEF	35
3.3	Les instabilités de combustion	36
3.3.1	Instabilités des forces de gravité	36
3.3.2	Instabilités hydrodynamiques	37
3.3.3	Instabilités thermo-diffusives	38
3.4	Définition des vitesses caractéristiques de flamme étirées	40
3.4.1	A partir de paramètres cinématiques locaux	40
3.4.2	A partir d'un paramètre global : la consommation	46
3.5	L'extrapolation à étirement nul	49
3.5.1	Les modèles d'extrapolation	49
3.5.2	La sensibilité à l'étirement et le nombre de Lewis du mélange : approche asymptotique avec la théorie hydrodynamique	52
3.5.3	La sensibilité à l'étirement et la vitesse de déplacement	55
3.5.4	La structure de flamme et l'étirement	57
3.5.5	Conclusion sur l'extrapolation de l'étirement	59
3.6	L'intervalle de mesures exploitables	60
3.6.1	L'impact de l'allumage : une borne inférieure	60
3.6.2	L'impact du confinement et des instabilités intrinsèques à l'écoulement : une borne supérieure	61
3.7	Conclusion sur les flammes en expansion sphériques libres	64
Partie II Dispositifs numériques et expérimentaux de l'étude		67
4	Outils dédiés à la simulation numérique directe des phénomènes instationnaires de combustion	69
4.1	La simulation de la combustion	71
4.1.1	Les équations de l'aérothermochimie	71
4.1.2	La résolution de la diffusion des espèces	72
4.1.3	La méthode numérique retenue : la DNS	72
4.1.4	La simulation du rayonnement thermique	75

4.1.5	Conclusion sur la simulation de la combustion	79
4.2	Les codes 1D sphériques	79
4.2.1	Le code <i>TORC</i>	79
4.2.2	Le code <i>A-SURF</i>	81
4.2.3	Conclusion sur les codes 1D	82
4.3	Le code 3D : <i>YALES2</i>	82
4.3.1	Présentation du code <i>YALES2</i>	82
4.3.2	Les outils numériques spécifiques utilisés dans <i>YALES2</i>	83
4.4	Conclusion sur les dispositifs dédiés à la simulation numérique	90
5	Dispositif expérimental au laboratoire PRISME	93
5.1	L'enceinte de mesure	94
5.1.1	Présentation du dispositif	94
5.1.2	Mesure dynamique de la pression	95
5.1.3	Méthode de préparation du mélange combustible	96
5.2	Diagnostics optiques	98
5.2.1	Diagnostic optique 1 : la technique d'ombroscopie	98
5.2.2	Diagnostic optique 2 : la diffusion Rayleigh	103
5.3	Conclusion	115
6	Dispositif expérimental au laboratoire CORIA	117
6.1	L'enceinte de mesure	118
6.1.1	Présentation du dispositif	118
6.1.2	Méthode de préparation du mélange combustible	120
6.2	Diagnostic optique : la tomographie laser	122
6.2.1	Présentation	122
6.2.2	L'ensemencement	125
6.2.3	Identification du rayon de flamme	128
6.2.4	Détermination du profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme	131
6.3	Conclusion	134
7	Etude sur la précision de mesure des dispositifs expérimentaux	135
7.1	Les facteurs d'incertitudes	136

7.2	Les installations expérimentales de la collaboration CPII	137
7.3	Précision de la préparation du mélange	139
7.4	La répétabilité tir à tir	141
7.5	Confrontation avec d'autres dispositifs expérimentaux	145
7.6	Conclusion	148
Conclusion		149
 Partie III Développement théorique nouveau, exploitation et analyse des résultats		 151
8	Définition et analyse des vitesses de flamme associées à la vitesse de combustion laminaire	153
8.1	Développement théorique explicite de la vitesse de consommation en configuration de flamme laminaire sphérique	155
8.1.1	Définition pour un domaine sphérique ouvert	157
8.1.2	Définition pour un domaine sphérique fermé	160
8.1.3	Validité des hypothèses	163
8.2	Analyse à partir de résultats numériques	164
8.2.1	Les équations de la vitesse de consommation	164
8.2.2	Impact des rayons équivalents sur la détermination expérimentale de la vitesse de consommation	167
8.3	Nouvelle méthode de mesure de la vitesse de consommation	172
8.3.1	Méthode de détermination de la densité instantanée des gaz frais	173
8.3.2	Validation numérique de l'équation	175
8.3.3	Application sur des données expérimentales	176
8.4	Détermination expérimentale de la vitesse de consommation	178
8.4.1	Détermination expérimentale du terme de compression à l'aide du signal de pression	179
8.4.2	Superposition de résultats numériques et expérimentaux	181
8.4.3	Résultats expérimentaux sur des mélanges au nombre de Lewis différent de 1	182
8.5	Conclusion sur la mesure de la vitesse de consommation	187

8.6	Bilan des équations expérimentalement exploitables pour mesurer la vitesse de combustion laminaire	189
9	Analyse de différents biais impactant la détermination de la vitesse de combustion laminaire	193
9.1	Les effets des échanges radiatifs d'énergie thermique	195
9.1.1	Choix du mélange	195
9.1.2	Analyse sur les vitesses de flamme extrapolées à étirement nul	196
9.1.3	Mesure de profils ponctuels temporels de température	202
9.1.4	Conclusion	207
9.2	Les effets de diffusion différentielle	210
9.2.1	Le mélange étudié	212
9.2.2	Résultats à pression atmosphérique	213
9.2.3	Perspectives de résultats pour des conditions sub-atmosphériques	219
9.2.4	Conclusion	220
9.3	Analyse des modèles d'extrapolation à étirement nul	222
9.3.1	Mélanges retenus pour l'étude	223
9.3.2	Nouvelle approche : comparaison directe mesures/simulations numériques	224
9.3.3	Incertitudes liées aux modèles d'extrapolation	226
9.3.4	Conclusion	230
Partie IV	Conclusion, perspectives et annexes	231
	Conclusion	233
	Perspectives	237
	Table des figures	248
	Liste des tableaux	249
	Bibliographie	249

Nomenclature

Acronymes

ADB Modèle de rayonnement adiabatique

CPII Nom donné à la collaboration entre les laboratoires : CORIA, PRISME, ICARE et ITV

DNS Direct Numerical Simulation

DRS Deficient Reactive Species

EDP Equation aux Dérivées Partielles

EGR Exhaust Gas Recirculation

ETL Equilibre Thermodynamique Local

ETR Equation de Transfert Thermique

FFT Fast Fourier Transform

FS-SNB-cK Full Spectrum - Statistical Narrow Band - correlated K

GC Chromatographe en phase gazeuse

IEA International Energy Agency

IFPEN Institut Français du Pétrole et Energies Nouvelles

LBV Laminar Burning Velocity

LES Large-Eddy Simulation

LIF Laser Induced Fluorescence

NTP Conditions thermodynamiques Normales de Température et de Pression

ODE Ordinary Differential Equation

OPSL Optically Pumped Semiconductor Laser

OTM Optically Thin Model

PID Proportionnal Integral Derivative

PIV Particle Image Velocimetry

PM Photomultiplicateur

RFSR Relative Flame Speed Ratio

SEF Spherical Expanding Flame

SNB Statistical Narrow Band

TMFC Thermal Mass Flow Controller

Exposants et indices

0 Exposant référant à la géométrie de flamme 1D plane adiabatique non étirée

ad Exposant référant aux conditions adiabatiques

b Indice référant aux gaz brûlés

eq Exposant référant aux conditions d'équilibre thermodynamique

u Indice référant aux gaz frais

Symboles grecs

β Nombre de Zeldovich [$J.mol^{-1}.K^{-1}$]

δ_f Epaisseur de flamme laminaire [m]

δ_p Epaisseur caractéristique de la zone de réaction [m]

δ_{th} Epaisseur caractéristique de la zone de dégagement de chaleur [m]

$\dot{\omega}_i$ Taux de réaction de l'espèce i , réactif ou produit [$kg.m^{-3}.s^{-1}$]

ℓ_i Longueur de Markstein associée à la vitesse i [m]

γ_u Rapport des capacités thermiques des gaz frais

κ Etirement total du front flamme [s^{-1}]

λ Conductivité thermique [$W.m^{-1}.K^{-1}$]

ϕ	Richesse du prémélange
ρ_b^{eq}	Densité des gaz brûlés à l'équilibre chimique adiabatique [$kg.m^{-3}$]
ρ_u	Densité des gaz frais en amont du front de flamme [$kg.m^{-3}$]
ρ_u^0	Densité des gaz frais à l'état initial [$kg.m^{-3}$]

Symboles latins

\dot{X}	Vitesse des gaz à la position X [$m.s^{-1}$]
\mathcal{M}	Masse molaire [$kg.mol^{-1}$]
\mathcal{X}	Fraction molaire
\tilde{Q}	Le dégagement de chaleur de la réaction de combustion
\tilde{S}_d	La vitesse de déplacement normalisée par le rapport de la densité locale sur la densité des gaz frais [$m.s^{-1}$]
$\tilde{S}_{d,b}$	Vitesse de déplacement de l'iso-surface séparant le front de flamme des gaz brûlés par rapport au gaz frais normalisée par le rapport des densités locale supposée homogène $\frac{\rho_b}{\rho_u}$ [$m.s^{-1}$]
$\tilde{S}_{d,u}$	Vitesse de déplacement de l'iso-surface séparant le front de flamme des gaz frais par rapport au gaz frais [$m.s^{-1}$]
C_p	Capacité calorifique massique à pression constante [$J.kg^{-1}.K^{-1}$]
D_{th}	Diffusivité thermique [$m^2.s^{-1}$]
Q_i	Débit massique de l'espèce i [$m^3.s^{-1}$]
R	Constante des gaz parfait [$J.mol^{-1}.K^{-1}$]
R_0	Rayon interne d'une sphère, i.e. la cellule de mesure expérimentale ou le domaine de calcul numérique [m]
R_f	Rayon de flamme, ne définissant aucun iso-contour particulier dans le front de flamme [m]
R_p	Rayon de flamme équivalent, défini pour espèce produite par l'Eq. 3.22 [m]
R_r	Rayon de flamme équivalent, défini pour l'espèce réactive minoritaire par l'Eq. 3.25 [m]

R_{tomo}	Rayon de flamme défini sur l'isotherme d'évaporation des particules d'huiles $T_{evap} = 570 K [m]$
ROI	Region Of Interest
S_c	Vitesse de consommation, liée au taux de réaction $\dot{\omega}$ [$m.s^{-1}$]
S_d	Vitesse de déplacement du front de flamme par rapport au gaz frais [$m.s^{-1}$]
S_f	Vitesse absolue de propagation du front de flamme dans le référentiel du laboratoire [$m.s^{-1}$]
S_l^0	Vitesse fondamentale de combustion laminaire d'une flamme 1D plane adiabatique non étirée [$m.s^{-1}$]
T_b	Température des gaz brûlés [K]
T_u	Température des gaz frais [K]
u	Vitesse des gaz frais dans le référentiel du laboratoire [$m.s^{-1}$]
U_g	Vitesse des gaz frais à l'entrée du front de flamme [$m.s^{-1}$]
X	Rayon définissant le contour d'un volume de contrôle arbitraire $V_a(t)$ dans les gaz frais [m]
D_{AB}	Coefficient de diffusivité moléculaire de A dans B [$m^2.s^{-1}$]

Nombre sans dimension

Le_D	Nombre de Lewis du réactif déficient
Le_E	Nombre de Lewis du réactif en excès
Le_{eff}	Nombre de Lewis effectif du mélange

Chapitre 1

Introduction

1.1 Introduction et motivation de cette étude

La combustion est une réaction chimique exothermique d'oxydo-réduction entre un carburant et un comburant initiée en présence d'une source d'énergie (chaleur, étincelle...) suffisante. Elle représente, depuis les débuts de l'ère industrielle, 80 % du mode de production d'énergie [1], que ce soit pour l'industrie, le bâtiment, le transport ou la production électrique. Les 20% restant représentent les divers autres modes de production, comme le nucléaire ou les énergies dites propres (l'hydroélectrique, l'hydrolien ou l'éolien,...). La figure 1.1 illustre cette dépendance à ce mode de production d'énergie en présentant la consommation mondiale en énergie au cours des quarante dernières années [1].

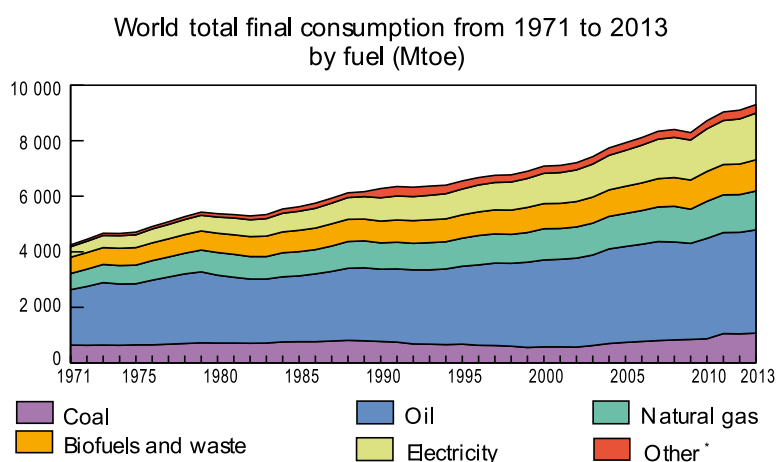


FIGURE 1.1 – Evolution de la consommation mondiale en énergie depuis les années 1970. * : La catégorie 'Other' comporte les énergies : géothermie, solaire, éolienne... (source : IEA 2015 [1]).

En effet, elle présente la combustion des énergies fossiles (pétrole, charbon et gaz naturel) comme le mode majoritaire de production d'énergies. De plus, cette part est en constante augmentation avec les années. Entre 1973 et 2013, la consommation mondiale de ces énergies a plus que doublé. Mais cette activité présente un impact sanitaire et environnemental non négligeable à cause de la pollution engendrée et de la production de gaz à effet de serre, comme le dioxyde de carbone (CO_2). La figure 1.2 présente sur la même durée les émissions mondiales de CO_2 liées à la combustion des carburants fossiles.

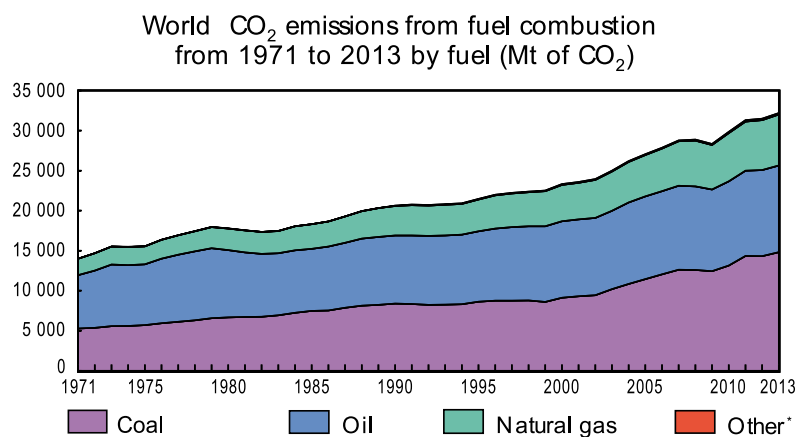


FIGURE 1.2 – Evolution de l'émission mondiale de CO_2 depuis les années 1970. * : La catégorie 'Other' comporte l'émission de la combustion des déchets non recyclables et des déchets ménagés (source : IEA 2015 [1]).

De plus, la croissance démographique mondiale, ainsi que l'émergence et le développement de nouveaux pays industriels, comme l'Inde ou la Chine, engendrent une augmentation continue de la demande énergétique. L'IEA prévoit une augmentation de 20 à 30 % de la consommation mondiale d'ici à 2040, comme illustré sur la figure 1.3. Elle présente les prédictions de la demande mondiale en énergie et des ressources utilisées pour la satisfaire pour deux scénarios : NPS et 450S. La combustion des ressources fossiles représente toujours dans ces prédictions la plus grande partie de la production énergétique. Cependant, ces énergies ne sont pas intarissables. L'IFPEN rapporte qu'environ 50 % des réserves mondiales de pétrole auraient été consommées à ce jour [2]. Soit la moitié sur une période d'exploitation par l'homme d'un peu plus d'un siècle.

Ainsi, une diversification de nos sources énergétiques est nécessaire pour le développement durable des activités humaines. Mais cette diversification nécessite le développement et la caractérisation de nouveaux carburants ou de nouveaux procédés de combustion. Tous deux doivent

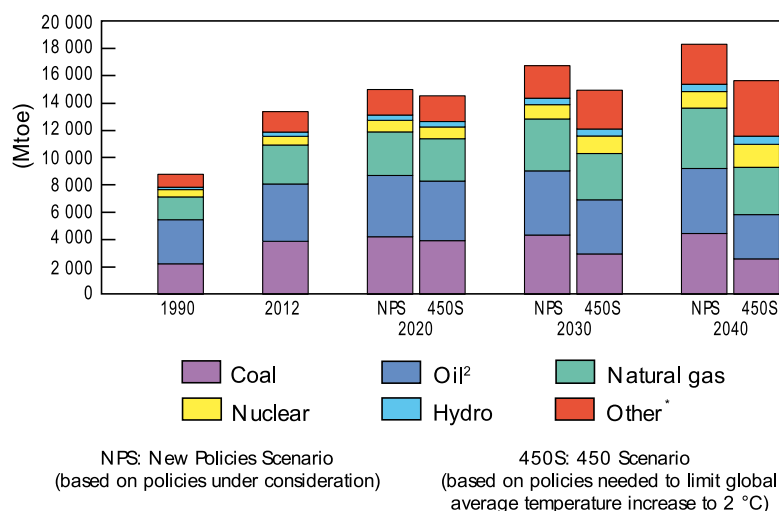


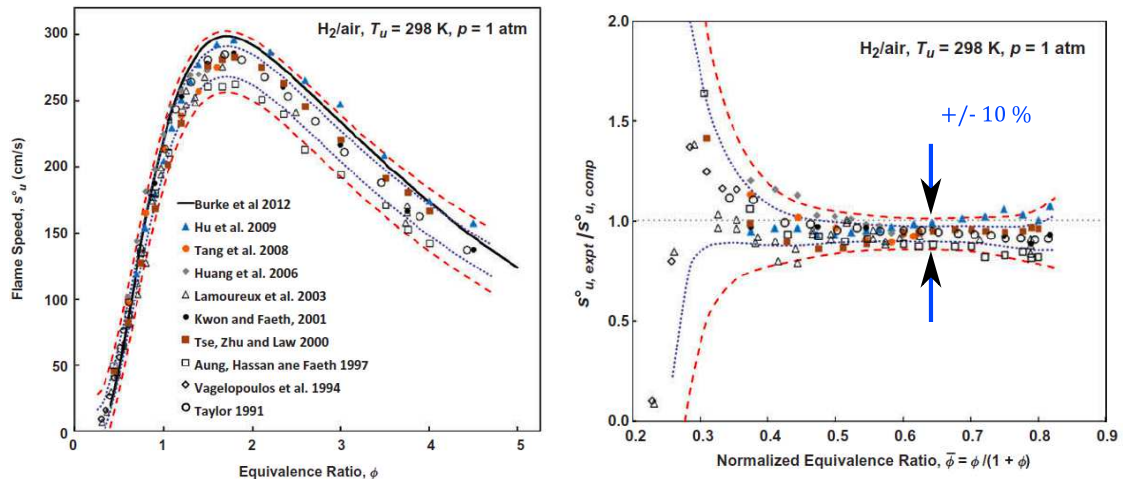
FIGURE 1.3 – Evolution et prédiction des sources et de leur consommation pour la production d'énergie de 1990 à 2040. * : La catégorie 'Other' comporte la valorisation de la combustion des déchets non recyclables et des déchets ménagés (source : IEA 2015).

aboutir à une meilleure efficacité des systèmes de production et une réduction des émissions polluantes.

L'étude et le développement de ces combustibles et techniques ont fait apparaître de nouveaux régimes de combustion qu'il est nécessaire de comprendre et caractériser pour assurer une combustion performante et réduire l'émission de polluants. On peut citer à titre d'exemple l'oxycombustion alliée à la recirculation de gaz d'échappement (EGR), qui est actuellement une voie utilisée et étudiée pour la diminution des émissions polluantes. Elle permet de diminuer la concentration initiale en azote et la température de combustion pour réduire la production de NO_x et facilite la capture du CO_2 dans les systèmes de post-traitement. Cependant, le dioxyde de carbone (CO_2) et l'eau (H_2O sous forme de vapeur ou gouttes) apportés par la recirculation des gaz brûlés provoquent une modification du comportement de la flamme à cause de phénomènes de dilution et de rayonnement thermique [3]. De plus, de nouveaux problèmes de sûreté liés au développement et à l'élargissement de nos procédés de production d'énergie doivent être étudiés, comme la stabilité des nouveaux combustibles, ou encore les scénarios de fuites et risques d'explosions sur les nouveaux réacteurs nucléaire de fusion (ITER) et dans les réservoirs de stockage des déchets de combustibles fissibles dû à la présence d'hydrogène hautement réactif [4].

Pour les flammes dont le carburant et le comburant sont mélangés avant allumage, la carac-

térisation de la combustion passe par la détermination de la vitesse de combustion laminaire. C'est un paramètre fondamental défini sur une flamme laminaire idéale de prémélange 1D plane non étirée qui informe sur la réactivité d'un mélange combustible et qui est propre à la composition du mélange et à chaque condition thermodynamique. Cette caractéristique des flammes de prémélange est utilisée depuis plus d'un demi-siècle pour caractériser ce mode de combustion. En pratique, cette vitesse permet de caractériser le taux de combustion d'un mélange, la stabilité de la combustion mise en place et ses limites d'inflammabilité. D'un point de vue plus fondamental, cette vitesse est une grandeur cible pour les schémas cinétiques qui décrivent les réactions chimiques fondamentales de la combustion. Elle est aussi un paramètre d'entrée pour certains modèles numériques de flammes turbulentes. Mais la mesure de ce paramètre reste un défi sur l'ensemble des dispositifs expérimentaux existants [5]. De plus, différents dispositifs sur une même configuration de flamme ne donnent pas nécessairement des résultats identiques. Pour illustrer ces difficultés, la figure 1.4(a) présente la vitesse de combustion laminaire mesurée en fonction de la richesse par différentes équipes, superposée avec des résultats issus d'une simulation, pour une flamme d' H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression. La figure 1.4(b) la complète et présente pour chaque équipe l'écart entre les résultats numériques et expérimentaux. L'ensemble des résultats présentés sur ces deux figures dénote une erreur



(a) Vitesse de combustion laminaire mesurée. (b) Ecart des mesures à une simulation numérique cible.

FIGURE 1.4 – Evolution de la vitesse de combustion laminaire en fonction de la richesse pour un mélange H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression, extraite de [6].

conséquente sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire, dont les origines peuvent

être multiples [7]. En effet, elles peuvent provenir des mesures brutes et/ou de l'interprétation de celle-ci pour exprimer la vitesse de combustion laminaire.

Or, la précision de la valeur de cette vitesse est une donnée fondamentale pour la validation des schémas cinétiques. La figure 1.5 présente l'évolution du coefficient caractéristique k_1 de la réaction $H + O_2 \rightarrow O + OH$ en fonction de l'inverse de la température. L'analyse de *H. Wang* [9]

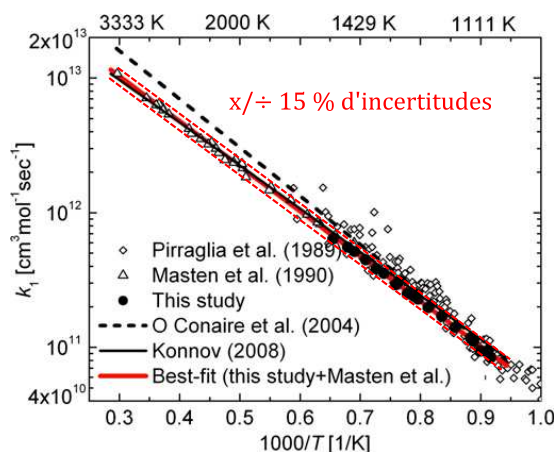


FIGURE 1.5 – Evolution du coefficient caractéristique k_1 de la réaction $H + O_2 \rightarrow O + OH$ en fonction de l'inverse de la température, extraite de [8].

sur cette figure a montré que pour contraindre un schéma cinétique, l'erreur sur la mesure de la vitesse de consommation ne devait pas excéder 4%. Cette valeur de l'erreur est plus de deux fois inférieure à l'écart minimal relevé entre les mesures de la vitesse de combustion laminaire de différents dispositifs sur la figure 1.4. Un formalisme et une estimation précise de la vitesse de combustion laminaire sont donc essentiels et nécessaires pour promouvoir le développement de nouveaux carburants et procédés de combustion dont les mélanges combustibles font face à des caractéristiques plus exotiques que la combustion classique d'hydrocarbure avec l'air.

Dans ce contexte, ces travaux de thèse ont été menés dans l'objectif d'étudier, d'analyser et de caractériser les techniques de détermination de la vitesse de combustion laminaire à partir des flammes en expansion sphériques. La section suivante expose comment a été abordée cette problématique en présentant l'organisation de ce manuscrit.

1.2 Organisation du mémoire

Ce mémoire est organisé en quatre parties distinctes.

La première : Partie I, se compose de deux chapitres :

- Chap. 2 : Flamme laminaire idéale de prémélange 1D plane non étirée. Il définit l'ensemble des concepts théoriques nécessaires à la compréhension des travaux qui sont présentés dans ce manuscrit sur une configuration de flamme idéale et simple. Les intérêts de cette configuration quant à la définition des paramètres fondamentaux et pour la simulation numérique sont notamment mis en avant.
- Chap. 3 : Flamme réelle de prémélange en expansion sphérique libre. Il présente comment peuvent être définis les paramètres fondamentaux de la flamme théorique 1D dans la configuration réelle de flamme sphérique en expansion et les difficultés qui en ressortent. Le choix de cette configuration de flamme et les méthodes d'exploitation des paramètres caractéristiques mesurés y sont détaillés. L'ensemble des difficultés liées à leur emploi et à la définition de la vitesse de combustion laminaire est exposé à partir d'une étude bibliographique.

La seconde : Partie II, présente tous les outils mis en place ou utilisés au cours des différentes collaborations effectuées pour ces travaux, qu'ils soient numériques ou expérimentaux. Elle est composée de quatre chapitres :

- Chap. 4 : Outils dédiés à la simulation numérique directe des phénomènes instationnaires de combustion. Trois différents codes numériques ont été utilisés au cours de plusieurs collaborations internes et externes aux laboratoires de rattachement. Leurs particularités et les données qu'ils permettent d'acquérir y sont clairement présentées.
- Chap. 5 : Dispositif expérimental au laboratoire PRISME. Il présente les capacités du dispositif et les techniques de mesures mises en place sur celui-ci : l'imagerie par ombroscopie et la mesure temporelle de signaux de diffusion Rayleigh.
- Chap. 6 : Dispositif expérimental au laboratoire CORIA. Il présente les capacités du dispositif et la technique de tomographie laser implémentée sur celui-ci. Une validation complète de l'utilisation de cette technique pour les flammes de prémélange étudiées dans ces travaux y est présentée.
- Chap. 7 : Etude sur la précision de mesure des dispositifs expérimentaux. Ce chapitre conclut la partie de présentation des dispositifs numériques et expérimentaux exploités au

cours de cette thèse. Il présente une analyse et caractérisation des sources d'incertitudes sur l'exploitation des dispositifs expérimentaux de flammes sphériques en expansion dans une enceinte à volume constant. Les résultats qu'il présente ont été réalisés pour une étude collaborative entre quatre laboratoires Européen :

1. CORIA UMR-6614, Rouen
2. PRISME UPRES-4229, Orléans
3. ICARE UPR-3021, Orléans
4. ITV, RWTH Aachen, Allemagne.

Cette collaboration a permis une étude pertinente, grâce à l'utilisation de plusieurs dispositifs et techniques de traitement, sur la précision des mesures et leur emploi pour déterminer la vitesse de combustion laminaire. Un point particulier est fait sur la précision, la fidélité et la fiabilité des mesures réalisées sur les deux dispositifs expérimentaux employés pour ces travaux de thèse.

La troisième : Partie III, est composée de deux chapitres :

- Chap. 8 : Définition et analyse des vitesses de flamme associées à la vitesse de combustion laminaire. Dans ce chapitre, la vitesse de consommation dans la configuration de flamme en expansion sphérique est explicitement définie pour une espèce quelconque, réactive ou produite, pour des domaines sphériques ouvert et fermé. Pour permettre de mesurer sur les dispositifs existants les équations de vitesse de consommation proposées, une nouvelle technique de mesure basée sur un traitement PIV d'images de tomographie laser est développée. Au final, un bilan des définitions de la vitesse de combustion laminaire mesurables et exploitables est réalisé.
- Chap. 9 : Analyse de différents biais impactant la détermination de la vitesse de combustion laminaire. Ce dernier chapitre propose une analyse des facteurs influents la valeur mesurée de la vitesse de combustion laminaire et des paramètres associés (Longueur de Markstein...). Il est axé sur trois phénomènes de perturbation de la mesure de la vitesse de combustion laminaire. Plusieurs mélanges combustibles aux propriétés diverses sont utilisés afin d'isoler chaque phénomène d'étude. Les trois effets étudiés sont :
 1. l'impact des transferts radiatifs d'énergie thermique pour les mélanges contenant initialement une grande quantité d'espèces rayonnantes dans la même gamme de fréquence que les gaz brûlés produits par la combustion,

2. les effets de la diffusion préférentielle,
3. l'impact des modèles d'extrapolation à étirement nul.

Enfin la quatrième : Partie IV, Conclusion et perspectives, synthétise l'ensemble des résultats de ce mémoire et suggère des perspectives à ces travaux.

Première partie

**Aspects théoriques des flammes
laminaires de prémélange**

Chapitre 2

Flamme laminaire idéale de prémélange 1D plane non étirée

Ce chapitre présente les concepts théoriques et les propriétés des flammes laminaires de prémélange pour la configuration simple et purement théorique de flamme 1D plane non étirée. Il définira ses paramètres fondamentaux, les mécanismes gouvernant sa propagation, ses propriétés physiques et le lien existant entre les propriétés chimiques et cinématiques dans cette géométrie particulière de flamme. L'intérêt de cette configuration idéale mais non réaliste sera également souligné.

Sommaire

2.1	Définition générale d'une flamme de prémélange	12
2.2	Les équations de conservation	14
2.3	Les équations de la chimie	15
2.4	Structure d'une flamme 1D plane non étirée	16
2.4.1	Définition de l'épaisseur de flamme	18
2.4.2	L'hypothèse de flamme infiniment mince	19
2.5	La vitesse de combustion laminaire	20
2.5.1	Définition d'une vitesse globale	20
2.5.2	Relation avec des paramètres cinématiques locaux de la flamme	22
2.6	Conclusion et intérêt de la configuration idéale 1D plane adiabatique non étirée	24

2.1 Définition générale d'une flamme de prémélange

On appelle flamme de prémélange une flamme dont le combustible et le comburant sont mélangés de manière homogène avant combustion. A l'opposé, une flamme de diffusion est une flamme où les réactifs sont séparés et se rencontrent uniquement dans la zone de réaction. La flamme de prémélange se caractérise par sa capacité à se propager en direction des gaz frais pour les consommer. Deux types de combustion prémélangée peuvent être définis, en fonction de l'écoulement où elle a lieu :

1. le régime de combustion laminaire : la flamme se propage dans un prémélange au repos ou en écoulement laminaire,
2. le régime de combustion turbulente : la flamme se développe dans un écoulement turbulent caractérisé par une multitude de tourbillons de taille, d'orientation, de vitesse et de localisation en constante variation. Ce type d'écoulement crée des transferts de matière dans des directions différentes à la direction moyenne de propagation.

L'étude de ce dernier, caractéristique notamment de la combustion dans un moteur à explosion interne et de la plupart des phénomènes de combustion industrielle, nécessite de connaître les paramètres fondamentaux de la flamme. C'est à partir de la caractérisation de la flamme en régime de combustion laminaire que ces paramètres fondamentaux sont extraits. On représente sur la figure 2.1 la schématisation d'une flamme laminaire de prémélange 1D plane non étirée adiabatique, caractérisée par sa capacité à se déplacer en direction des gaz frais pour les consommer. Elle est définie comme une interface où a lieu la réaction de combustion, appelée front de flamme, d'épaisseur finie séparant les gaz frais (mélange combustible et comburant) des gaz brûlés (produits de la réaction chimique). Dans cette configuration idéale, la vitesse

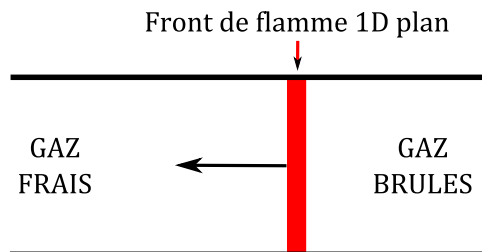


FIGURE 2.1 – Schématisation classique d'une flamme laminaire de prémélange 1D plan.

de combustion laminaire, S_l^0 , représente la vitesse à laquelle la flamme consomme les gaz frais. Ainsi, cette vitesse se définit comme une grandeur globale liée au taux de réaction de la flamme.

Par changement de référentiel, cette vitesse fondamentale se définit aussi à l'aide de paramètres cinématiques comme la vitesse de propagation de la flamme de prémélange 1D plane non étirée adiabatique par rapport aux gaz frais [10, 11].

La vitesse de combustion laminaire, S_L^0 , est un paramètre fondamental, caractéristique de la dynamique de la combustion d'un mélange, qui rend compte de sa diffusivité, de sa réactivité et de son exothermicité. Il dépend des conditions thermodynamiques initiales, pression et température, ainsi que de la richesse du mélange. La richesse est définie comme le ratio entre la quantité de combustible et de comburant. Soient ν'_F , ν'_O et ν'_P les coefficients stoechiométriques respectivement du combustible (Fuel), du comburant (Oxydant) et des produits de combustion. En considérant une réaction chimique à une étape, on peut écrire l'équation de combustion comme :



avec \vec{Q} le dégagement de chaleur produit par la combustion. Pour un mélange donné, lorsque tous les réactifs sont consommés par la combustion, on dit que le mélange est à richesse stoechiométrique. C'est-à-dire qu'aucun des réactifs n'est apporté en excès. Leur fraction molaire est multiple de celle de l'équation 2.1. S'il y a plus de carburant (noté Fuel par la suite) que d'oxydant, le mélange est qualifié de riche. Dans le cas inverse, le mélange est qualifié de pauvre. Le rapport des fractions massiques de Fuel (Y_F) et d'Oxydant (Y_O) à la stoechiométrie est défini par :

$$\left(\frac{Y_O}{Y_F}\right)_{st} = \frac{\nu'_O \mathcal{M}_O}{\nu'_F \mathcal{M}_F} = s, \quad (2.2)$$

avec \mathcal{M}_F et \mathcal{M}_O les masses molaires du Fuel et de l'Oxydant. La richesse ϕ du mélange s'exprime alors comme le rapport des fractions massiques des conditions d'étude sur le même rapport dans les conditions stoechiométriques :

$$\phi = \frac{\left(\frac{Y_F}{Y_O}\right)}{\left(\frac{Y_F}{Y_O}\right)_{st}} = s \frac{Y_F}{Y_O}. \quad (2.3)$$

Par analogie avec les explications précédentes, un mélange stoechiométrique correspond à une richesse $\phi = 1$, un mélange pauvre à $\phi < 1$ et un mélange riche à $\phi > 1$. La richesse permet aussi de caractériser les limites d'inflammabilité du mélange combustible/comburant. Ces limites (inférieure et supérieure) définissent un intervalle où l'inflammation du mélange est possible pour des conditions thermodynamiques initiales de température et de pression données.

2.2 Les équations de conservation

Un mélange combustible est un milieu fluide continu régi par les équations de Navier-Stokes, traduisant la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie, auxquelles s'ajoute une équation de transport pour chaque espèce, traduisant quant à elle la conservation des espèces chimiques. C'est l'introduction de cette dernière équation qui permet de prendre en compte la réactivité du mélange.

Cet ensemble de quatre équations forme un système d'équations aux dérivées partielles (EDP) qu'il est possible de résoudre numériquement, quelle que soit la géométrie considérée. Mais dans le cas d'une configuration de flamme 1D plane non étirée, permettant de limiter les équations à une unique dimension spatiale normale à la propagation du front de flamme, ce système est réduit, comme démontré dans [11]. Il se compose des équations de conservation de la masse, des espèces et de l'énergie et se développe avec les hypothèses suivantes :

- la propagation de flamme est stationnaire,
- la flamme se propage sans perte thermique,
- la combustion est à pression constante, i.e. que la variation de pression à travers le front de flamme est négligée,
- les forces visqueuses sont négligées,
- le taux de réaction, $\dot{\omega}_k$, est régi par une loi de type Arrhenius,
- la vitesse de diffusion V_k est régie par une loi de Fick et la masse molaire moyenne est constante à travers le domaine,
- un faible nombre de Mach, i.e. une pression homogène dans tout le domaine.

Poinsot & Veynante précisent que l'équation de conservation du moment peut être utilisée après la résolution des autres équations pour déterminer le champ de pression et ainsi vérifier que le saut de pression à la traversée du front de flamme est négligeable [11].

Ainsi, des informations caractéristiques sur une flamme de prémélange (vitesse de combustion, température ou encore profils d'espèces) sont accessibles par la résolution numérique du système d'équations exprimées suivant l'unique direction x , composé de :

1. l'équation de conservation de la masse :

$$\rho u = cste, \tag{2.4}$$

2. l'équation de conservation des espèces :

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} \rho Y_k V_k = \dot{\omega}_k, \quad (2.5)$$

3. l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \rho u C_p \frac{dT}{dx} - \left(\rho \sum_{k=1}^{N_{esp}} C_{p,k} Y_k V_k \right) = \sum_{k=1}^{N_{esp}} \dot{\omega}_k, \quad (2.6)$$

4. l'équation d'état :

$$P = \frac{\rho R T}{\mathcal{M}}, \quad (2.7)$$

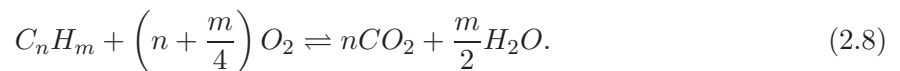
avec R la constante des gaz parfaits et \mathcal{M} la masse molaire moyenne du mélange.

Avec l'équation d'état 2.7, ce système d'EDP est fermé et composé de $N_{esp} + 3$ équations, avec N_{esp} le nombre d'espèces du schéma cinétique employé.

Comme il vient d'être annoncé, la résolution de ce système est la méthode la plus simple pour caractériser une flamme de prémélange à l'aide de calculs numériques. Un des intérêts de la géométrie particulière des flammes planes 1D non étirée est donc de pouvoir simuler une flamme de prémélange le plus simplement possible et ainsi ne s'intéresser qu'à la résolution de la réaction chimique de combustion. A titre d'exemple, ce système d'équations est celui résolu par les codes numériques *PREMIX* [12] et *CANTERA* [13] qui permettent de caractériser une flamme de prémélange en résolvant la réaction chimique à l'aide d'un schéma cinétique sélectionné par rapport au carburant et aux conditions thermodynamiques étudiées. A noter que le premier est issu de la collection de programmes *CHEMKIN*, développée au laboratoire national SANDIA, Californie, USA.

2.3 Les équations de la chimie

Classiquement, la combustion d'un hydrocarbure dans l'air est modélisée par l'équation globale faisant intervenir les réactifs et les produits de combustion :



Mais une telle réaction ne décrit pas l'intégralité des réactions élémentaires N_r , réversibles ou non, sur l'ensemble des espèces intermédiaires N_{esp} , minoritaires ou majoritaires, qui constituent

réellement la combustion. Le système des N_r réactions entre les N_{esp} s'écrit :

$$\sum_{k=1}^{N_{esp}} \nu'_{kr} \varphi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_{esp}} \nu''_{kr} \varphi_k, \quad r = 1, \dots, N_r, \quad (2.9)$$

avec φ_k le symbole chimique de l'espèce k . Les symboles ν'_{kj} et ν''_{kj} représentent respectivement les coefficients molaires direct et inverse de l'espèce k pour la réaction r . En introduisant le coefficient stoechiométrique net $\nu_{kr} = \nu''_{kr} - \nu'_{kr}$, la conservation de la masse du système redéfinit cette équation par :

$$\sum_{k=1}^{N_{esp}} \nu_{kr} \varphi_k = 0 \quad (2.10)$$

L'équation 2.9 est la plus générale pour qualifier un schéma cinétique. Le taux d'avancement, $\dot{\Omega}_r$, de la réaction r peut s'écrire comme :

$$\dot{\Omega}_r = k_{dr} \prod_{k=1}^{N_{esp}} [X_k] \nu'_{kr} - k_{ir} \prod_{k=1}^{N_{esp}} [X_k] \nu''_{kr}, \quad (2.11)$$

où k_{dr} et k_{ir} sont respectivement les taux de réaction direct et inverse de la réaction r . En général, k_{dr} est défini par une loi de type Arrhénius et k_{ir} par le rapport entre k_{dr} et la constante d'équilibre réactionnel. Le taux de réaction $\dot{\omega}'_k$ de chaque espèce est alors :

$$\dot{\omega}'_k = \sum_{r=1}^{N_r} \dot{\omega}'_{kr} = \sum_{r=1}^{N_r} \mathcal{M}_k \nu_{kr} \dot{\Omega}_r. \quad (2.12)$$

Au final, l'expression du terme source présent dans l'équation de transport 2.5 est :

$$\dot{\omega}_k = \frac{\dot{\omega}'_k}{\rho} \quad (2.13)$$

La sommation de l'intégralité des termes sources définit ainsi, en utilisant l'Eq. 2.10 :

$$\sum_{k=1}^{N_{esp}} \dot{\omega}_k = \sum_{k=1}^{N_{esp}} \left(\sum_{r=1}^{N_r} \dot{\omega}'_{kr} \right) = 0. \quad (2.14)$$

La modélisation du terme source, nécessaire pour la fermeture du système d'EDP, constitue l'une des difficultés majeures de la modélisation de la combustion.

2.4 Structure d'une flamme 1D plane non étirée

La structure d'une flamme de prémélange est pilotée par l'aéro-thermochimie environnant à travers les phénomènes de transport de masse et de chaleur, de convection et de la chimie. La théorie de Mallard et Le Chatellier [14] divise le front de flamme, séparant les gaz brûlés des gaz frais, en deux zones distinctes :

1. une zone de préchauffage où la température augmente jusqu'à l'inflammation du mélange, i.e. l'initiation de la réaction chimique,
2. et une zone de réaction caractérisée par le dégagement de chaleur.

Cette structure est représentée sur la figure 2.2. Les gaz frais se propagent vers le front de

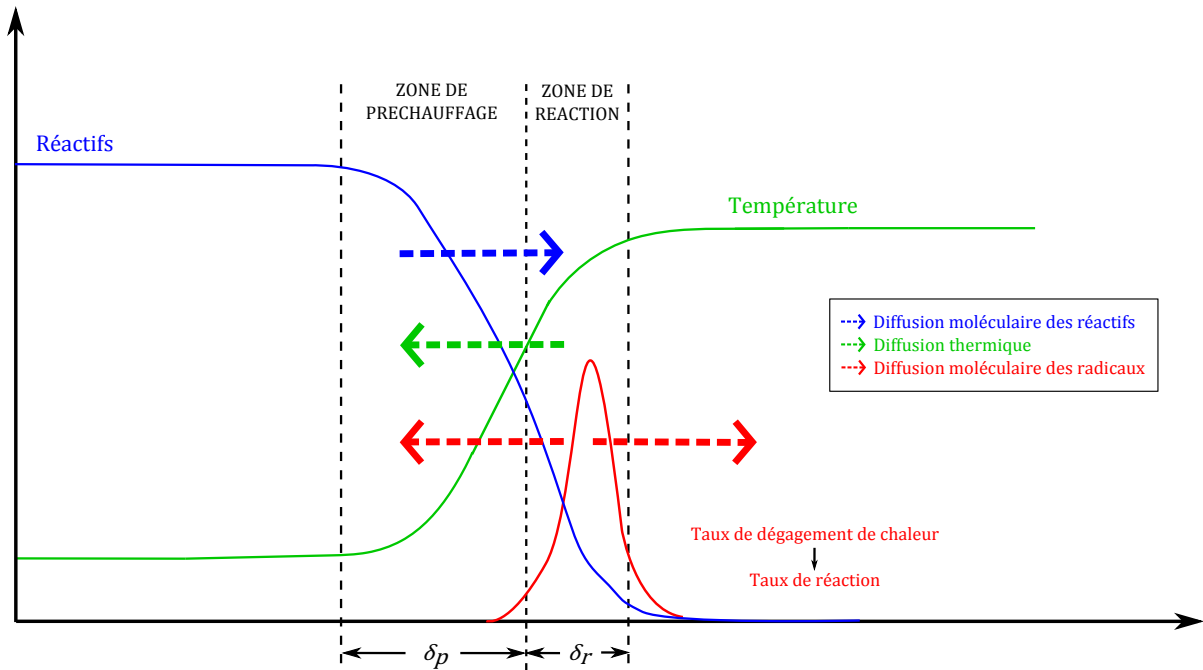


FIGURE 2.2 – Schéma de la structure d'une flamme laminaire de prémélange 1D

flamme. Dans la zone de préchauffage, la diffusion en sens opposé de la chaleur et des espèces radicalaires produites par la combustion amène les gaz frais dans les conditions d'inflammation. La combustion est alors initiée à l'entrée de la zone de réaction. La réaction chimique de combustion s'opère dans toute cette zone et produit le dégagement de chaleur \ddot{Q} (Eq.2.1). Au final, les produits de combustion forment en aval du front de flamme les gaz brûlés.

Les conditions d'inflammation d'un mélange ne doivent pas être confondues avec les conditions d'auto-inflammation. En effet, l'auto-inflammation est provoquée uniquement à partir des conditions thermodynamiques (pression et température), tandis que les conditions d'inflammation sont pilotées par la combinaison entre les conditions thermodynamiques et la diffusion moléculaire des radicaux, telles que :

- si la diffusion moléculaire est négligeable, les conditions d'inflammation se rapprochent des conditions d'auto-inflammation,
- si la diffusion des radicaux est importante, comme pour les flammes d'hydrogène/air,

l'allumage de la réaction est facilité par les radicaux et la température d'inflammation est inférieure à la température d'auto-inflammation.

La diffusion des espèces dans le front de flamme peut être pilotée par deux phénomènes physiques distincts :

- les gradients de concentration : c'est la diffusion de Fick,
- les gradients de température : c'est la diffusion de Soret.

Dans la plupart des phénomènes de combustion, le mode de diffusion de Fick est le mode dominant et la diffusion de Soret n'est significative, devant celle de Fick, que pour des molécules très légères (ex : H_2) ou très lourdes soumises à un intense gradient de température.

2.4.1 Définition de l'épaisseur de flamme

Il existe dans la littérature plusieurs définitions de l'épaisseur de flamme δ_f , comme répertorié dans [15]. La figure 2.3 présente les deux définitions les plus communément employées :

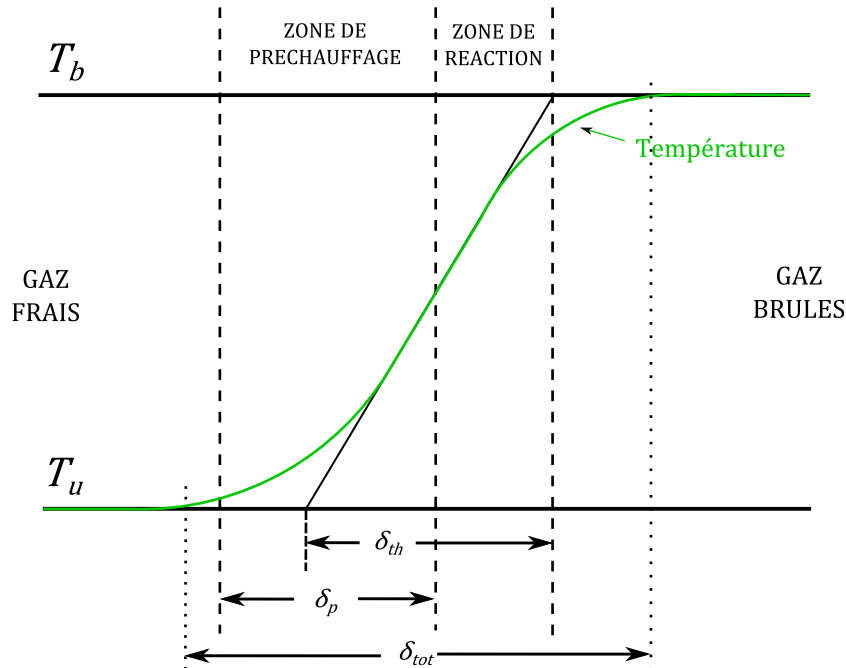


FIGURE 2.3 – Définitions des épaisseurs de flamme de prémélange

1. La première est l'épaisseur caractéristique définie par Zeldovich [16] comme :

$$\delta_p = \frac{\lambda}{\rho_u C_p S_l^0} = \frac{D_{th}}{S_l^0}, \quad (2.15)$$

avec D_{th} est la diffusivité thermique des gaz frais telle que :

$$D_{th} = \frac{\lambda}{\rho_u C_p}. \quad (2.16)$$

Dans ces deux équations, λ est la conductivité thermique des gaz frais, C_p est la capacité calorifique massique des réactifs à pression constante, ρ_u est la masse volumique des gaz frais et S_l^0 est la vitesse fondamentale de combustion laminaire du front de flamme. L'équation 2.15 résulte de l'équilibre entre les diffusions thermique et moléculaire. δ_p correspond alors à la distance parcourue par les gaz frais dans la zone de préchauffage pour atteindre leur température d'inflammation. Néanmoins, cette définition de l'épaisseur de flamme est inférieure aux mesures expérimentales, comme présenté dans [17], et nécessite de connaître les propriétés thermiques des gaz frais D_{th} et la vitesse de combustion laminaire S_l^0 .

2. La seconde est l'épaisseur thermique du front de flamme, définie par Spalding [18] comme :

$$\delta_{th} = \frac{T_b - T_u}{\left(\left| \vec{\text{grad}} T \right| \right)_{max}}, \quad (2.17)$$

où T_b et T_u sont respectivement les températures des gaz brûlés et des gaz frais. Comparée à δ_p (Eq. 2.15), cette définition se rapproche plus des mesures d'épaisseur de flamme disponible expérimentalement. Elle caractérise la zone de dégagement de chaleur et nécessite de connaître le profil de température.

Notons tout de même qu'il est possible de définir une épaisseur de flamme dite "totale", δ_{tot} , comme l'intervalle entre lequel la température réduite ($\frac{T-T_u}{T_b-T_u}$) est comprise entre 0.01 et 0.99. Mais cette grandeur n'est pas caractéristique d'une flamme réelle car elle n'a aucun rapport avec les profils d'espèces ou de température au travers du front de flamme [11].

2.4.2 L'hypothèse de flamme infiniment mince

L'hypothèse de flamme infiniment mince est le modèle le plus simple pour représenter un front de flamme. Il y est assimilé à une interface d'épaisseur nulle séparant deux milieux à l'équilibre thermodynamique : les gaz frais et les gaz brûlés. Dans cette configuration, le transport ainsi que la chimie ne sont pas pris en compte et seule la dynamique de l'écoulement est résolue. L'application des équations de saut de Rankine-Hugoniot est possible. La discontinuité des

paramètres physiques de la flamme, tels que la température ou la concentration, est représentée sur la figure 2.4 dans le cas d'un mélange pauvre ou stoechiométrique. Dans le cas d'un mélange riche, la fraction massique de fuel dans les gaz brûlés n'est pas nulle : $Y_f^b \neq 0$. Ce modèle

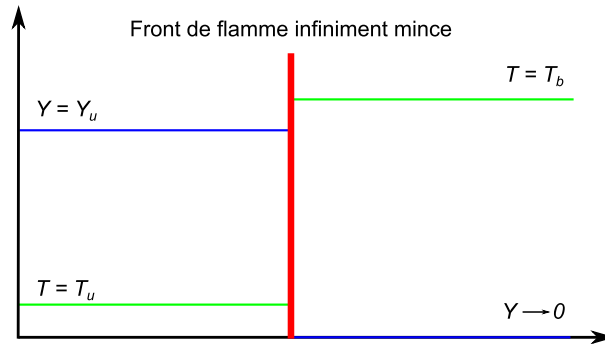


FIGURE 2.4 – Schéma d'une flamme infiniment mince

est souvent employé pour développer de manière simplifiée les équations de conservation. Cette méthode de résolution uniquement de l'écoulement est la théorie asymptotique hydrodynamique. Son emploi est parfaitement valide dans cette géométrie 1D puisque le flux surfacique de masse (ρu) à travers le front de flamme est constant. Elle sera rencontrée comme un cas limite de développement des équations dans le chapitre suivant.

2.5 La vitesse de combustion laminaire

La notion de vitesse est un élément central pour l'étude des phénomènes de combustion prémélangée. Il existe plusieurs définitions et différentes façons de la mesurer expérimentalement [11]. Il est possible de définir des vitesses locales, i.e. liées à une isotherme du front de flamme, ou bien globales, i.e. liées au profil spatial d'une espèce produite ou consommée dans le front de flamme. Ces vitesses sont respectivement liées aux propriétés cinématiques de la flamme ou à l'intégrale du taux de réaction d'une espèce réactive ou produite. La section suivante présente ces différentes vitesses et le lien existant avec la vitesse fondamentale S_l^0 pour la configuration idéale de flamme 1D plane adiabatique non étirée.

2.5.1 Définition d'une vitesse globale

La vitesse de combustion laminaire (LBV), noté S_l^0 , a été définie dans la section 2.1 comme la vitesse à laquelle les gaz frais sont consommés par le front de flamme. Elle représente donc

une quantité globale qui définit le taux réaction auquel le front de flamme 1D plan adiabatique consomme les gaz frais.

Elle doit de plus satisfaire par définition le système d'équation présenté dans la section 2.2.

Ainsi, l'équation de conservation de la fraction massique d'une espèce k (Eq. 2.5) impose :

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} \rho Y_k V_k = \dot{\omega}_k, \quad (2.18)$$

avec ρ et u respectivement la densité et la vitesse locale du fluide dans le référentiel du front de flamme. Or d'après l'équation 2.4 :

$$\rho u = cste = \rho_u S_c^0, \quad (2.19)$$

avec ρ_u la densité des gaz frais et S_c^0 la vitesse de consommation des gaz frais par la flamme. Notons que par définition, la vitesse de consommation exprimée dans cette dernière équation est égale à la vitesse de combustion laminaire : $S_c^0 = S_l^0$. L'équation 2.18 se réécrit alors :

$$\rho_u S_c^0 \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} \rho Y_k V_k = \dot{\omega}_k, \quad (2.20)$$

L'intégration de l'équation 2.20 sur le domaine défini entre $-\infty$ et $+\infty$ en considérant la somme des termes de diffusion nulle conduit à :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_u S_c^0 \frac{dY_k}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_k dx. \quad (2.21)$$

Au final, la vitesse de combustion laminaire se définit dans la configuration de flamme 1D plane non étirée par :

$$S_l^0 = S_c^0 = \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_k dx, \quad (2.22)$$

avec Y_k^u et Y_k^b respectivement les fractions massiques de l'espèce k en $+\infty$ et $-\infty$. Notons que si $k = f = fuel$, cette équation se simplifie pour un mélange pauvre ou stoechiométrique car l'intégralité du fuel est consommée par la flamme et alors : $Y_f^b = 0$.

Le terme de droite de l'équation 2.22 correspond à la masse de carburant consommée par la flamme dans la zone de réaction où le taux de réaction est non nul. Par définition, la vitesse de combustion laminaire est alors égale à la vitesse de consommation de l'espèce k exprimée à partir du taux de réaction $\dot{\omega}_k$. C'est une quantité globale qui n'est pas associée à une iso-surface dans le front de flamme. De plus, la valeur de la vitesse de consommation n'est pas fonction de l'espèce k considérée dans cette configuration.

Cette affirmation a pu être vérifiée à l'aide de calculs 1D réalisés avec le code numérique YALES2

(cf Chap. 4). En effet, la simulation d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression avec le schéma cinétique *GRI-mech 3.0* [19] a permis de constater que quelle que soit l'espèce k ciblée : réactive, produite ou radicalaire intermédiaire, la vitesse de combustion laminaire est constante et vaut : $S_l^0 = 37.3 \text{ cm.s}^{-1}$.

2.5.2 Relation avec des paramètres cinématiques locaux de la flamme

Notons en premier lieu qu'à cause de la géométrie plane 1D, toutes les vitesses définies ici sont coplanaires.

2.5.2.1 Définition d'une vitesse locale : la vitesse de déplacement

Une vitesse caractéristique des flammes de prémélange 1D plane est la vitesse de déplacement, S_d^0 . C'est une vitesse relative qui se définit comme la vitesse d'une iso-surface caractéristique d'un scalaire (T, Y_k, \dots) contenue dans l'épaisseur de flamme par rapport aux gaz frais, dans la direction normale au front [20, 21]. Ainsi, en considérant l'iso-surface liée à l'isotherme $T = T^*$, son expression est :

$$S_d^0 = (\vec{S}_f + \vec{u}) \cdot \vec{n} = S_f^0 - u, \quad (2.23)$$

dans la direction normale définie par le vecteur unitaire :

$$n = \frac{\nabla T}{|\nabla T|}. \quad (2.24)$$

S_f^0 et u représente respectivement la vitesse de propagation absolue du front de flamme et la vitesse des gaz dans un référentiel fixe et extérieur au front, On peut noter, à partir de cette expression, que pour toute iso-surface dans le front de flamme où le fluide est au repos, la vitesse de déplacement est égale à la vitesse de propagation absolue.

2.5.2.2 Relation entre la vitesse de déplacement et la vitesse de combustion laminaire

Le lien entre les vitesses locales et la vitesse de combustion laminaire se définit à partir de l'équation de conservation de la masse (Eq. 2.4). La vitesse de déplacement S_d^0 est liée à S_l^0 par la relation :

$$\begin{aligned} \rho_u S_l^0 &= \rho S_d^0, \\ \Leftrightarrow S_l^0 &= \frac{\rho}{\rho_u} S_d^0 = \frac{\rho}{\rho_u} (S_f^0 - u), \end{aligned} \quad (2.25)$$

avec ρ et u respectivement la densité et la vitesse locales du fluide. Dans cette relation, le terme de droite est défini comme la vitesse de déplacement normalisée par le rapport de la densité locale sur la densité des gaz frais, noté \tilde{S}_d^0 [21]. Cette vitesse est directement comparable à la vitesse de combustion laminaire.

Lorsque la vitesse de déplacement est définie sur l'isotherme d'entrée des gaz frais dans le front de flamme à $T = T_u$, elle exprime alors la vitesse de combustion laminaire de manière cinématique sans faire intervenir le rapport de densité :

$$S_l^0 = \tilde{S}_{d,u}^0 = S_d^0|_{T=T_u} = S_f^0 - u|_{T=T_u} = S_f^0 - u_g. \quad (2.26)$$

C'est la définition cinématique de la vitesse de combustion laminaire présentée à la section 2.1 : la vitesse du front de flamme par rapport aux gaz frais.

Au contraire lorsque la vitesse de déplacement est définie sur l'isotherme séparant le front de flamme des gaz brûlés : $T = T_b$, alors le rapport de densité est conservé et S_d^0 s'exprime :

$$S_l^0 = \tilde{S}_{d,b}^0 = \tilde{S}_d^0|_{T=T_b} = \frac{\rho_b}{\rho_u} (S_f^0 - u|_{T=T_b}) \quad (2.27)$$

Classiquement l'hypothèse de fluide au repos à la sortie du front de flamme est introduite, i.e. $u|_{T=T_b} = 0$. L'expression 2.27 est alors simplifiée à :

$$\tilde{S}_{d,b}^0 = \tilde{S}_d^0|_{T=T_b} = \frac{\rho_b}{\rho_u} (S_f^0 - u|_{T=T_b}) = \frac{\rho_b}{\rho_u} S_f^0. \quad (2.28)$$

Cette dernière relation permet de relier directement la vitesse de combustion laminaire à la vitesse de propagation absolue. En incluant de plus l'hypothèse de flamme infiniment mince séparant deux milieux homogènes distincts, chacun à l'équilibre thermodynamique, cette équation prend la forme :

$$S_l^0 \approx \tilde{S}_{d,b}^0 = \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u} S_f^0, \quad (2.29)$$

avec ρ_b^{eq} la densité des gaz brûlés à l'équilibre thermodynamique adiabatique. Cette dernière relation liant la vitesse de propagation absolue à la vitesse de combustion laminaire est la plus communément employée expérimentalement pour mesurer S_l^0 bien qu'elle introduise une hypothèse sur l'état thermodynamique et cinématique des gaz brûlés. Pour la résoudre, ρ_b^{eq} est généralement estimée à partir de solveurs chimiques adiabatiques. Dans la suite de ce manuscrit, l'influence des différentes hypothèses et la méthode d'emploi de cette dernière équation seront étudiées en détail sur des flammes réelles.

2.6 Conclusion et intérêt de la configuration idéale 1D plane adiabatique non étirée

En conclusion, l'étude des flammes de prémélange laminaires permet la définition des paramètres caractéristiques d'un mélange combustible (richesse, vitesse de combustion laminaire...), qui sont essentiels pour analyser des phénomènes de combustion turbulente plus complexes. Ce chapitre aura permis la présentation de ces paramètres fondamentaux sur la géométrie simple et idéale de flamme 1D plane adiabatique non étirée à travers la définition de la structure de flamme et de ses vitesses. Et notamment la vitesse fondamentale de combustion laminaire S_l^0 qui est un paramètre cible pour la validation des schémas cinétiques et un paramètre d'entrée des simulations en combustion turbulente en régime de flammelle [7, 22].

De plus, les intérêts particuliers associés à cette géométrie de flamme idéale ont été mis en avant. A partir des flammes 1D planes adiabatiques non étirées :

1. le système d'EDP pour déterminer numériquement les caractéristiques d'un mélange est simplifié. Il est réduit à quatre équations, contenant moins de termes que leurs formes générales. Cette géométrie présente donc un fort atout en termes de temps de calcul pour la simulation numérique.
2. la vitesse de combustion laminaire S_l^0 y est définie sans ambiguïté, que ce soit dans sa définition globale égale la vitesse de consommation ou par une approche cinématique, comme démontré dans la section 2.5. Ainsi, cette géométrie de flamme permet de définir l'égalité :

$$S_l^0 = S_c^0 = \tilde{S}_d^0, \quad (2.30)$$

avec S_d^0 définie pour toute isotherme dans le front de flamme. Cette égalité n'est pas nécessairement directement valide pour d'autres géométries.

Cette configuration de flamme est purement théorique et permet de définir sans ambiguïté différents paramètres caractéristiques des flammes de prémélange. Néanmoins, elle ne se rencontre pas dans la réalité. En effet, une flamme ne pourrait rester parfaitement plane à cause des effets de multiples perturbations : les interactions avec les parois, les phénomènes d'extinction, les instabilités de combustion, de la turbulence... De plus, l'étirement que peut subir le front de flamme doit être pris en compte car il modifie son évolution et donc l'évaluation de ces paramètres fondamentaux. Ainsi, le chapitre suivant définit pour une configuration de flamme

réelle, sélectionnée pour l'étude expérimentale de ce manuscrit, ces paramètres fondamentaux et présente les facteurs influents sur leur valeur et leur évolution.

Chapitre 3

Flamme réelle de prémélange en expansion sphérique libre

Ce chapitre présente l'application des concepts théoriques et des propriétés sur des flammes de prémélange réelles. Différents dispositifs d'études expérimentales sont présentés en mettant en avant leurs avantages et inconvénients. La configuration de flamme en expansion sphérique (SEF) sélectionnée pour notre étude sera particulièrement détaillée. Les différentes vitesses caractéristiques des flammes de prémélange seront définies dans la géométrie de flammes sphériques laminaires. Puis, les phénomènes physiques se répercutant sur les flammes réelles et l'influence particulière de cette géométrie de flamme sur la définition de ses propriétés seront présentés et analysés.

Sommaire

3.1	Choix de la configuration	29
3.2	L'étirement du front de flamme	33
3.2.1	Définition générale	33
3.2.2	Expression en configuration SEF	35
3.3	Les instabilités de combustion	36
3.3.1	Instabilités des forces de gravité	36
3.3.2	Instabilités hydrodynamiques	37
3.3.3	Instabilités thermo-diffusives	38
3.4	Définition des vitesses caractéristiques de flamme étirées	40
3.4.1	A partir de paramètres cinématiques locaux	40
3.4.2	A partir d'un paramètre global : la consommation	46
3.5	L'extrapolation à étirement nul	49
3.5.1	Les modèles d'extrapolation	49
3.5.2	La sensibilité à l'étirement et le nombre de Lewis du mélange : approche asymptotique avec la théorie hydrodynamique	52
3.5.3	La sensibilité à l'étirement et la vitesse de déplacement	55
3.5.4	La structure de flamme et l'étirement	57
3.5.5	Conclusion sur l'extrapolation de l'étirement	59
3.6	L'intervalle de mesures exploitables	60
3.6.1	L'impact de l'allumage : une borne inférieure	60
3.6.2	L'impact du confinement et des instabilités intrinsèques à l'écoulement : une borne supérieure	61
3.7	Conclusion sur les flammes en expansion sphériques libres	64

3.1 Choix de la configuration

Comme nous l'avons annoncé au chapitre précédent, la configuration de flamme 1D plane non étirée ne peut pas être réalisée expérimentalement, à cause de contraintes extérieures. En effet, l'étude d'un front de flamme réel soumis à des effets d'étirement (champ de vitesse des gaz frais non homogène), de pertes thermiques ou d'une combinaison des deux, dans un écoulement laminaire ou au repos doit être capable de caractériser avec précision ces facteurs influents et de les prendre en compte pour exprimer la vitesse de combustion laminaire (LBV). Dans cette optique, il existe plusieurs dispositifs expérimentaux de flammes laminaires, utilisant différentes approches et hypothèses, pour la mesurer. Les quatre principaux sont :

- a) **la flamme conique** [23, 24, 25] : une flamme de prémélange est stabilisée à la sortie d'un tube cylindrique où les gaz frais sont injectés à une vitesse supérieure à la LBV, S_L^0 . En visualisant la flamme par une technique optique (chimiluminescence, Schlieren ou tomographie), S_L^0 est déterminée à partir d'une relation faisant intervenir la surface de flamme, définie par sa hauteur et sa largeur, et la vitesse d'injection des gaz frais. Mais cette méthode présente plusieurs inconvénients comme la non-uniformité de l'étirement et de la vitesse le long du front de flamme, les pertes de chaleur avec le nez du brûleur, la forte courbure au sommet de la flamme et une définition de la surface de flamme sujette à controverses [10].
- b) **la flamme à jets opposés** [26, 27, 28, 29, 30] : deux flammes d'un même prémélange sont stabilisées autour du plan d'arrêt créé par deux jets d'injection montés face à face. Elles ne subissent pas d'interactions directes avec l'extérieur (nez du brûleur ou plaque d'arrêt par exemple) et la flamme est stationnaire. De plus, la vitesse des gaz, frais et brûlés, suivant l'axe défini par le centre des deux injecteurs peut être estimée par méthode optique. Mais cette configuration est soumise à de très forts étirements tangentiels induits par l'écoulement dont les lignes de courant sont perpendiculaires au front de flamme. Il est donc nécessaire d'introduire une relation entre l'étirement et les vitesses mesurées pour déduire S_L^0 . Cette relation pouvant être de type linéaire [31] ou non-linéaire [32]. De plus, réaliser des mesures à pression élevée est compliqué avec cette technique car la flamme rencontre des problèmes d'instabilités.
- c) **la flamme plate "adiabatique" stabilisée** [33, 34, 35, 36] : (Heat Flux Method) une flamme plane est stabilisée au dessus d'une plaque perforée chauffée. Ce chauffage allié à

la gestion de la vitesse d'injection des gaz frais permet de créer une flamme "adiabatique" en compensant les pertes thermiques du front de flamme vers le brûleur avec le chauffage des gaz frais par la plaque perforée. De plus, l'étirement sur cette géométrie de flamme peut être négligé et la vitesse de combustion supposée constante sur toute la largeur de la flamme. Au final la vitesse d'injection est reliée à S_l^0 lorsque la flamme est parfaitement stabilisée sans nécessité d'introduire de lourds diagnostics de mesures. Cependant, la stabilisation de l'écoulement et de la combustion en proche paroi ainsi que les conditions limites de l'écoulement fluide en aval peuvent induire des incertitudes non négligeables sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire.

d) la flamme en expansion sphérique libre (SEF) [21, 7, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44] :

la flamme est initiée dans un milieu combustible homogène initialement au repos contenu dans un enceinte fermée, qui permet soit de conserver un volume constant, soit de conserver une pression constante. La flamme créée dans cette configuration est instationnaire. Si elle se propage de manière laminaire, la géométrie sphérique réduit le système tri-dimensionnel d'équations caractéristiques de la flamme à une seule : la direction radiale \vec{e}_r . Notons que même avec cette réduction, le calcul d'une flamme instationnaire sera toujours plus lourd que celui d'une flamme stationnaire pour être comparable à l'expérience [5]. Deux techniques de mesures existent dans la configuration SEF :

- La méthode dite à pression constante. La propagation du front de flamme peut être enregistrée par méthode optique et permet de mesurer les vitesses de flamme étirées et de définir clairement l'étirement du front de flamme κ grâce à la topologie de la flamme. La cellule de mesure doit donc disposer de passages optiques. En considérant le rayon interne de la cellule de mesure (R_0) très supérieur au rayon de flamme (R_f), soit $R_0 \gg R_f$, l'élévation de pression et de température associée peuvent être négligées. La flamme peut alors être soumise uniquement aux effets d'étirement. Et comme pour les flammes à jets opposés, S_l^0 est estimée en appliquant un modèle d'extrapolation à étirement nul sur les mesures. Cependant, les mesures exploitables sur ce type de configurations sont restreintes par la géométrie de la chambre, les instabilités de combustion et le système d'allumage. Tous ces facteurs seront présentés en détail par la suite.
- La méthode dite à volume constant. Le signal de pression est enregistré pendant la propagation de la flamme dans l'intégralité de la cellule. Il permet alors de mesurer

S_l^0 à partir d'équations issues du développement des équations de conservation, avec différentes hypothèses comme une surface de flamme faiblement étirée ou encore une compression isentropique des gaz frais. La présence de passages optiques sur la cellule de mesure n'est donc pas nécessaire. Mais cette technique présente quelques inconvénients : l'élévation de pression dans les premiers instants de développement de la flamme, i.e. $R_f \ll R^0$, est très faible et limite l'utilisation du signal de pression dans cet intervalle comme annoncé dans [10]. Les hypothèses du développement des équations ne sont pas forcément valides à tout instant du développement de la flamme, comme lorsqu'elle se propage avec des cellularités à sa surface. Néanmoins, Xiouris et al. [45] ont récemment proposé une méthode pour estimer la vitesse de combustion laminaire initialement à de fortes pression et température dans cette configuration sur une plage de données où l'élévation de pression respecte le critère $\frac{P}{P(t=0)} > 2.5$. Mais le front de flamme peut rencontrer dans cet intervalle de nombreuses perturbations, comme exposé dans la suite de ce chapitre, qui perturbent l'estimation de S_l^0 .

Ces différents dispositifs et leurs états de flamme associés sont représentés sur la figure 3.1.

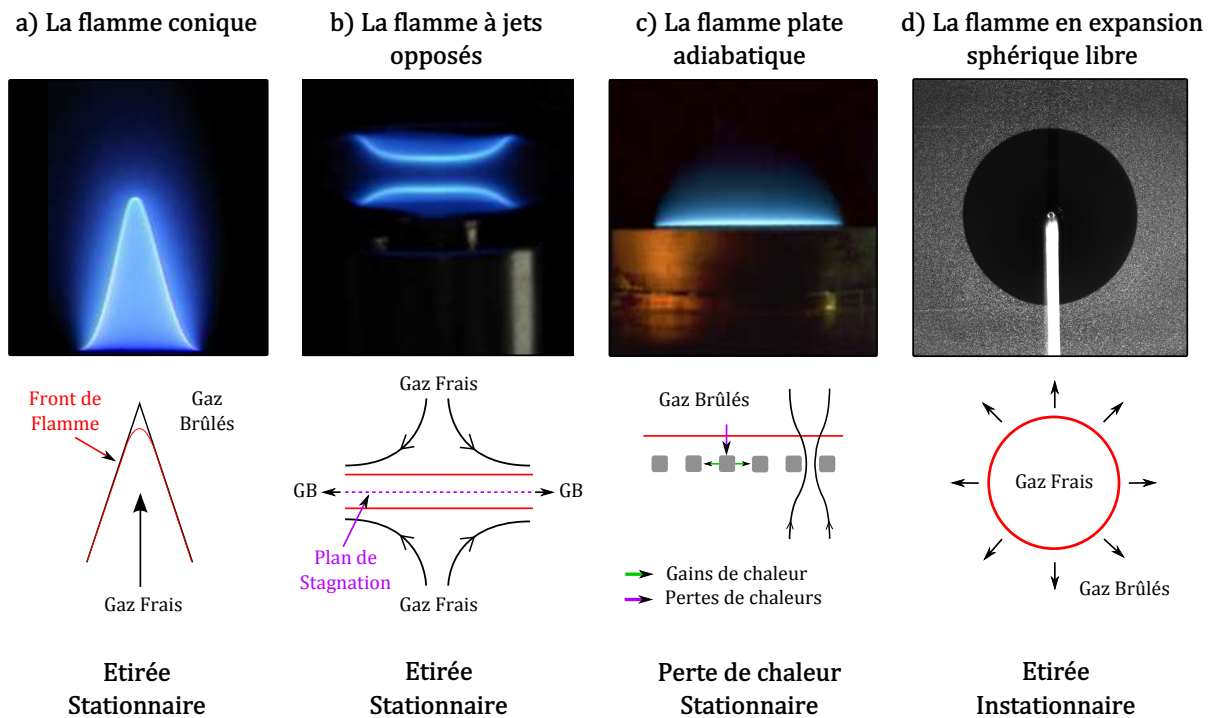


FIGURE 3.1 – Schéma de différentes configurations expérimentales de flamme laminaire et de leurs états de flamme associés.

Parmi tous ces dispositifs, les flammes en expansion sphérique (SEF) ont été largement utilisées pour déterminer expérimentalement la vitesse de combustion laminaire, notamment car elles permettent des mesures pour des conditions thermodynamiques de pression et de température élevées avec une approche simple. En effet, ces conditions caractéristiques des moteurs utilisés dans les domaines du transport ou de la production d'énergie, sont complexes à réaliser avec des flammes stationnaires car elles y rencontrent des problèmes de stabilité.

La configuration SEF fut introduite dans les années 1920 par *Stevens* [46, 47] qui étudia la propagation d'un mélange combustible enfermé dans une bulle de savon par photographie. La bulle de savon agit alors comme une enceinte close à pression constante. En 1934, *Lewis & von Elbe* [48] furent les premiers à utiliser cette configuration dans une enceinte close à volume constant pour mesurer la LBV à partir de l'enregistrement du signal de pression. Notons que cette méthode utilisée telle quelle jusque dans les années 1980 ne permettait pas d'avoir accès à l'état du front de flamme et donc de déterminer son étirement ou de vérifier la présence de cellularité qui peuvent tous deux fortement modifier l'estimation de la LBV. L'hétérogénéité des résultats obtenus au cours de cette période est illustrée sur la figure 3.2 qui présente la LBV mesurée pour une flamme CH_4/air stoechiométrique à température et pression ambiantes, extraite de [49]. Sur cette figure est présentée par un point rouge la valeur de $S_l^0 = 45 \pm 2 \text{ cm/s}$ recommandée en 1972 par *Andrews & Bradley* [10] dans leur revue comparant plusieurs techniques de mesure.

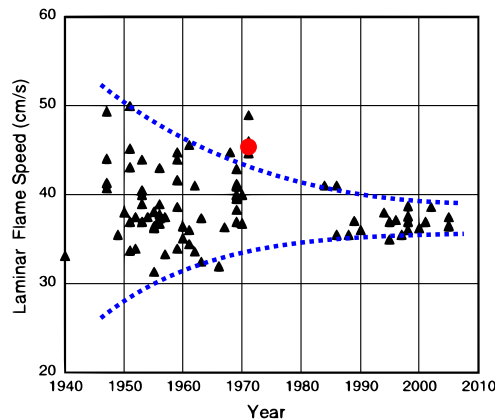


FIGURE 3.2 – Valeur de la LBV mesurée pendant la seconde moitié du XX^e siècle d'une flamme stoechiométrique CH_4/air à pression et température ambiante, extrait de [49].

Cette figure démontre aussi qu'à partir des années 1980 et l'apparition des méthodes optiques permettant l'observation de l'état du front de flamme, la définition d'un rayon de flamme

$R_f(t)$ et de son évolution, les vitesses de flamme mesurées pour une même flamme stoechiométrique CH_4/air à pression et température ambiantes par différentes équipes convergent vers la valeur de $36 \pm 2 \text{ cm/s}$. Cette convergence s'explique par l'amélioration des dispositifs expérimentaux au cours du temps; mais aussi et surtout par la prise en compte des effets de l'étirement sur les configurations expérimentales [50]. Et en particulier sur la configuration SEF par l'établissement de relations (linéaire ou non-linéaire) entre la vitesse de propagation du front de flamme $S_f = \frac{dR_f(t)}{dt}$ et l'étirement total κ pour mesurer la vitesse non-étirée : S_f^0 .

La suite de cette étude sera exclusivement axée sur les mesures dans la configuration de flamme sphérique en expansion libre (SEF). Et plus particulièrement sur les mesures effectuées en enceinte close à volume constant. Les hypothèses générales de cette configuration considérant une combustion adiabatique avec au centre des gaz brûlés inertes à l'état d'équilibre chimique où le front de flamme se propage librement sans être perturbé par des instabilités hydrodynamiques ou thermo-diffusives, seront discutées et des modèles de détermination de S_f^0 , nécessitant ces hypothèses ou non, seront présentés.

3.2 L'étirement du front de flamme

L'étirement représente le taux d'accroissement local de la surface de flamme en fonction du temps. Il permet de caractériser l'effet combiné de la courbure et des contraintes tangentielles, assimilables à un cisaillement, imposées par l'écoulement sur celle-ci. Ce sont les études de *Karlovitz et al.* [51] en 1953 et de *Markstein* [52, 53] en 1951 et 1964 qui mirent en avant l'impact non négligeable de l'étirement de la surface de la flamme sur sa vitesse de déplacement. Dès lors, pour obtenir la vitesse de flamme non-étirée S_f^0 caractéristique d'un mélange combustible à partir de mesures sur des flammes étirées, il est nécessaire de définir clairement l'étirement total κ et d'introduire une correction sur les vitesses mesurées expérimentalement.

3.2.1 Définition générale

Williams [54] a introduit en 1975 l'expression générale de l'étirement total de la surface de flamme comme :

$$\kappa = \frac{1}{\delta A} \frac{d\delta A}{dt}, \quad (3.1)$$

avec δA un élément de surface infinitésimal.

La figure 3.3 schématise, sur un élément δA d'une surface S se propageant à la vitesse S_f vers des gaz frais à la vitesse u , la déformation imposée par l'étirement totale.

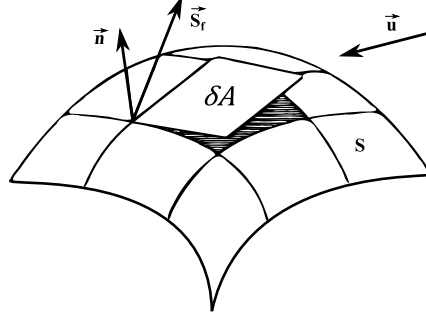


FIGURE 3.3 – Schéma d'un élément de surface δA soumis à des effets de courbure et de cisaillement [55].

A partir d'une approche cinématique, il est possible de décomposer l'étirement total κ en deux composantes, liées à la géométrie de la flamme et à l'écoulement [56] :

$$\begin{aligned}\kappa &= \mathcal{H}_{courbure} + \mathcal{H}_{cisaillement} \\ &= \vec{S}_f \cdot \vec{n} \mathcal{C} + \mathcal{H}_{cisaillement} \\ &= S_f^n \mathcal{C} + \mathcal{H}_{cisaillement}\end{aligned}\quad (3.2)$$

où l'exposant n définit la projection suivant la normale \vec{n} d'un vecteur, \mathcal{C} représente le facteur lié à la courbure et $\mathcal{H}_{cisaillement}$ représente le facteur lié au cisaillement, tels que :

$$\begin{aligned}\mathcal{C} &= \nabla \cdot \vec{n} \\ &= -\left(\frac{1}{\mathcal{R}_1} + \frac{1}{\mathcal{R}_2}\right)\end{aligned}\quad (3.3)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{cisaillement} &= -\vec{n} \cdot \mathbf{E} \cdot \vec{n} \\ &= (\vec{u} \cdot \vec{n}) \mathcal{C} + \nabla_\tau \cdot \vec{u}_\tau\end{aligned}\quad (3.4)$$

où $1/\mathcal{R}_1$ et $1/\mathcal{R}_2$ sont deux rayons de courbure caractéristiques, tels que \mathcal{R}_1 correspond au plus grand rayon de courbure et \mathcal{R}_2 le rayon obtenu dans la direction normale \vec{n} . \mathbf{E} représente le tenseur des contraintes qui peut s'exprimer comme : $\frac{1}{2}(\nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T)$. Il est développé tel que le premier terme de droite de l'Eq. 3.4 correspond aux contraintes normales et le second aux contraintes tangentielles. Au final, l'étirement total κ peut s'exprimer comme :

$$\begin{aligned}\kappa &= S_f^n \nabla \cdot \vec{n} + \underbrace{(\vec{u} \cdot \vec{n}) \nabla \cdot \vec{n} + \nabla_\tau \cdot \vec{u}_\tau}_{\text{Cisaillement global}} \\ &= (S_f^n - u^n) \nabla \cdot \vec{n} + \nabla_\tau \cdot \vec{u}_\tau \\ &= (S_d) \nabla \cdot \vec{n} + \nabla_\tau \cdot \vec{u}_\tau\end{aligned}\quad (3.5)$$

Dans cette dernière expression, $S_d = S_f^n - u^n$ représente la vitesse de déplacement de la flamme normale à sa surface dans le référentiel des gaz frais. Dans le cas où les vitesses \vec{S}_f et \vec{u} sont coplanaires à \vec{n} , l'expression de la vitesse de déplacement se simplifie à $S_d = S_f - u$.

Notons que ces deux contributions à l'étirement total ont aussi été mises en évidence par *Candel & Poinso* [57] à partir de l'équation de transport du vecteur unitaire normal \vec{n} sur un élément de surface δA .

Dès lors, à partir de l'analyse des termes de l'Eq. 3.5 et de la figure 3.4, la flamme réagit à l'étirement tel que :

1. En fonction de la courbure positive ou négative, la propagation normale peut respectivement étendre ou diminuer la surface de flamme.
2. En fonction de la courbure positive ou négative, la vitesse projetée dans la direction normale \vec{n} des gaz frais peut diminuer ou étendre la surface de flamme.
3. La divergence de la composante tangentielle de la vitesse positive ou négative crée un effort tangentiel qui étend ou diminue respectivement la surface de flamme.

Gaz brûlés

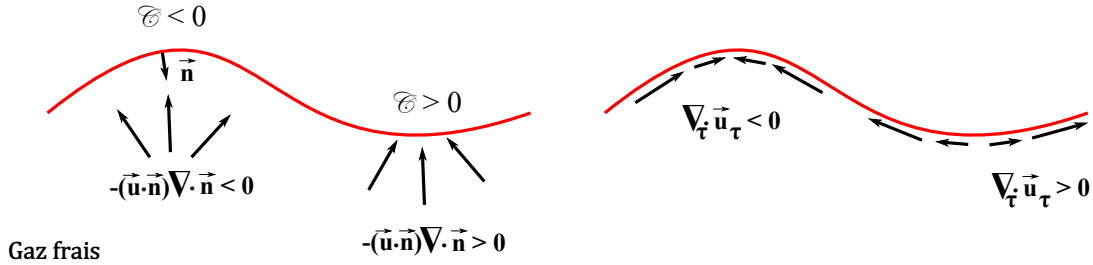


FIGURE 3.4 – Schéma de l'impact de la courbure et du cisaillement sur la surface de flamme.

3.2.2 Expression en configuration SEF

A partir de l'Eq. 3.1, l'étirement total d'une flamme en expansion sphérique libre de surface $A_f = 4\pi R_f^2$ s'exprime comme :

$$\kappa = \frac{2}{R_f} \frac{dR_f}{dt} = \frac{2}{R_f} S_f. \quad (3.6)$$

Ainsi, l'étirement total est défini simplement pour la configuration SEF et ne nécessite que la détermination du rayon de flamme R_f . C'est un des intérêts de cette géométrie de flamme : la définition non ambiguë et simple de l'étirement de la surface de flamme.

On peut noter qu'il est possible d'exprimer chacune des composantes de l'étirement, $\mathcal{K}_{courbure}$ et $\mathcal{K}_{cisaillement}$ (Eq. 3.2). *Bradley et al.* [37] les définissent pour des flammes en expansion sphérique libre par :

$$\mathcal{K}_{courbure} = \frac{1}{R_f} S_d \quad (3.7) \qquad \mathcal{K}_{cisaillement} = \frac{1}{R_f} u \quad (3.8)$$

Ainsi, chaque composante de l'étirement est aussi bien définie mais nécessite des paramètres locaux plus complexes à mesurer : S_d et u .

Au final, l'étirement est un paramètre intrinsèque des flammes en expansion sphérique qui a une valeur positive ($\frac{dR}{dt} > 0$) et doit être pris en compte pour toute étude dans cette géométrie de flamme. De part la topologie sphérique du front de flamme, son expression est définie clairement et sans ambiguïté (Eq. 3.6). Les gammes d'étirement mesurées classiquement sur les dispositifs expérimentaux définissent des flammes laminaires dont la structure peut être supposée constante et non modifiée par l'étirement.

3.3 Les instabilités de combustion

Lorsqu'un front de flamme laminaire se propage dans un milieu combustible, il est soumis à différentes forces et interactions telles que des hétérogénéités de concentration ou de température qui peuvent influencer la dynamique de la flamme et créer des instabilités qui vont modifier la morphologie du front de flamme. Certaines sont liées au système d'étude (les instabilités dues aux forces de gravités), et d'autres sont intrinsèques aux mécanismes de propagation du front de flamme (les instabilités hydrodynamique et thermo-diffusives).

3.3.1 Instabilités des forces de gravité

Les instabilités de gravité se rencontrent lorsque deux fluides de densité différente sont superposés. Elles induisent un mouvement des fluides qui favorise ou contre le déplacement du front de flamme, comme indiqué sur la figure 3.5. Si les gaz frais, plus denses, sont au-dessus alors la propagation de flamme est favorisée car ils sont attirés vers le front de flamme qui se propage dans le sens opposé. L'effet des forces de gravité est alors stabilisant. Au contraire, si les gaz frais sont en-dessous, les forces de gravité attirent le front de flamme dans la direction de propagation du front de flamme. Dans ce cas, l'effet de gravité est déstabilisant. Dans le cas

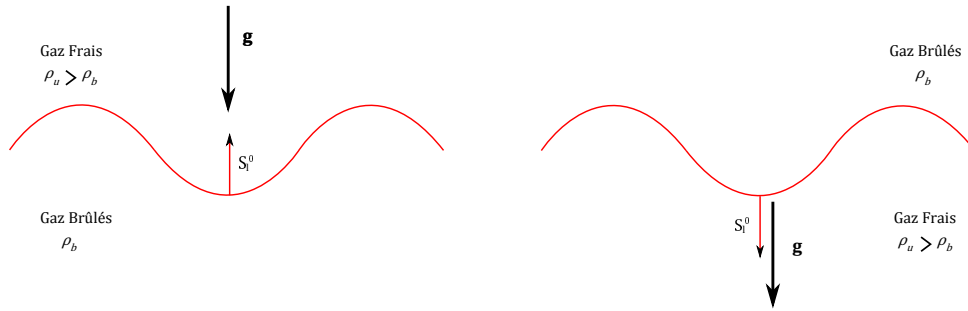


FIGURE 3.5 – Schéma d'un front de flamme perturbé par des instabilités induites par les forces de gravité.

d'une flamme en expansion sphérique, i.e. une configuration de gaz brûlés entourés de gaz frais, ces instabilités vont ovaliser la flamme et induire un déplacement de l'ensemble des gaz brûlés contenus dans la sphère vers le haut. Néanmoins, les temps caractéristiques nécessaires à la mise en place de ces instabilités sont très grands devant ceux de la chimie ou de la propagation du front de flamme. Et uniquement les flammes avec de très faibles vitesses de propagation, i.e. proches de l'extinction, peuvent être influencées. D'après l'étude expérimentale de *Ronney & Wachman* [58], des vitesses de combustion supérieures à 15 cm/s ne sont pas influencées par la gravité. De telles gammes de vitesse si faibles ne seront pas étudiées dans ce manuscrit, c'est pourquoi les instabilités de gravité ne seront pas considérées par la suite.

3.3.2 Instabilités hydrodynamiques

Ces instabilités ont été introduites par les études de Darrieus [59] et Landau [60] qui ont étudié les effets hydrodynamiques sur un front de flamme infiniment mince tout en négligeant les effets de diffusion. Leurs études sur des flammes planes ont démontré qu'une flamme considérée comme une discontinuité hydrodynamique est inconditionnellement instable. Considérant le front de flamme comme une interface entre deux milieux de densité différente ρ_u et ρ_b , respectivement la densité des gaz frais et brûlés, les équations de conservations prises dans le référentiel du front de flamme imposent [11] :

$$\rho u = \rho_u u_- = \rho_b u_+, \quad (3.9)$$

avec u_- et u_+ respectivement la vitesse normale au front de flamme des gaz frais et brûlés, de part et d'autre de la discontinuité. Ainsi la vitesse normale est multipliée d'un facteur $\frac{\rho_b}{\rho_u}$ à la traversé du front de flamme. Ce facteur est appelé facteur d'expansion thermique. Cette variation de la vitesse des gaz induit une déviation des lignes de courant telle que ces lignes

convergent dans les zones où la flamme est convexe et divergent dans les zones où la flamme est concave. La courbure des lignes de courant va alors induire un gradient de pression parallèle au front de flamme qui se répercute sur la vitesse des gaz. Les gaz frais accélèrent devant les zones concaves et ralentissent devant les zones convexes, comme illustré sur la figure 3.6. Ce phénomène est responsable d'une augmentation continue du plissement du front de flamme.

Les premières applications de ces instabilités sur des flammes sphériques furent présentées par

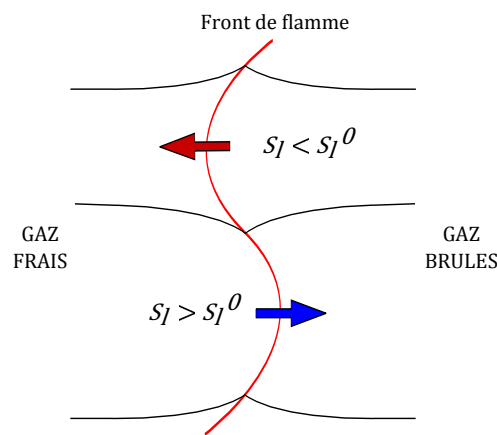


FIGURE 3.6 – Schéma d'un front de flamme perturbé par des instabilités hydrodynamiques associées à la déflexion des lignes de courant.

Istratov & Librovitch [61] puis par *Bechtold & Matalon* [62].

3.3.3 Instabilités thermo-diffusives

Les instabilités thermo-diffusives résultent de la compétition entre la diffusion moléculaire (flux de masse) et la diffusion thermique (flux de chaleur) qui créent des enrichissements locaux d'espèces réactives ou de chaleur. Ces flux tangents à la propagation du front de flamme peuvent soit le stabiliser, soit favoriser la formation de structures cellulaires. Ils sont caractérisés par le nombre de Lewis défini comme le rapport de la diffusivité thermique D_{th} sur la diffusivité moléculaire D_m :

$$Le = \frac{D_{th}}{D_m}. \quad (3.10)$$

Exprimé sous cette forme, le nombre de Lewis est généralement défini avec la diffusivité massique du réactif limitant : le carburant pour $\phi \leq 1$ et le comburant pour $\phi > 1$. Par conséquent il y a discontinuité de sa valeur à la stoechiométrie. Une définition continue du nombre de Lewis a été proposée par les travaux de *Bechtold & Matalon* [63] qui expriment un nombre de Lewis effectif

comme une moyenne pondérée du nombre de Lewis des réactifs en excès (E) et en déficit (D) par l'équation :

$$Le_{eff} = 1 + \frac{(Le_E - 1) + (Le_D - 1) A}{1 + A}, \quad (3.11)$$

où $A = 1 + \beta(\phi - 1)$, avec β le nombre de Zeldovich. Cette évolution continue en fonction de la richesse est représentée sur la figure 3.7 et comparée à l'évolution discontinue du nombre de Lewis exprimé avec les réactifs en excès (E) et en déficit (D). C'est avec ce nombre de Lewis

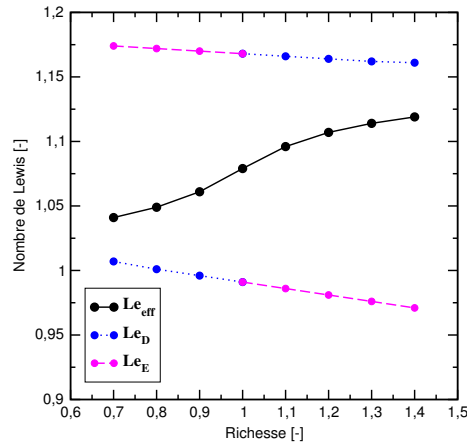


FIGURE 3.7 – Evolution du nombre de Lewis effectif, comparée au nombre de Lewis des réactifs en Excès et en Déficit, en fonction de la richesse pour une flamme CH_4/air .

effectif que seront qualifiés les mélanges combustibles utilisés pour l'étude présentée dans ce manuscrit.

D'après [64], les instabilités thermo-diffusives ont un effet différent sur le front de flamme en fonction d'un nombre de Lewis critique proche de 1, tel que :

- $Le > Le_c$: La diffusivité thermique est supérieure à la diffusivité moléculaire. Il y a augmentation de la température dans les zones concaves et diminution dans les zones convexes. Ces changements de température impliquent donc une augmentation de la vitesse du front dans les zones concaves et une diminution dans les zones convexes, lissant les plissements. Les effets thermo-diffusifs sont dits **stabilisants**.
- $Le < Le_c$: La diffusivité moléculaire est supérieure à la diffusivité thermique. La concentration en réactif est augmentée dans les zones convexes et donc la vitesse du front augmente. Au contraire les zones concaves s'appauvrissent en réactif et la vitesse du front diminue. Les plissements de flamme sont alors accentués par ces instabilités. Elles sont

dites dans ce cas **déstabilisantes**.

Ces effets sont schématisés sur la figure 3.8.

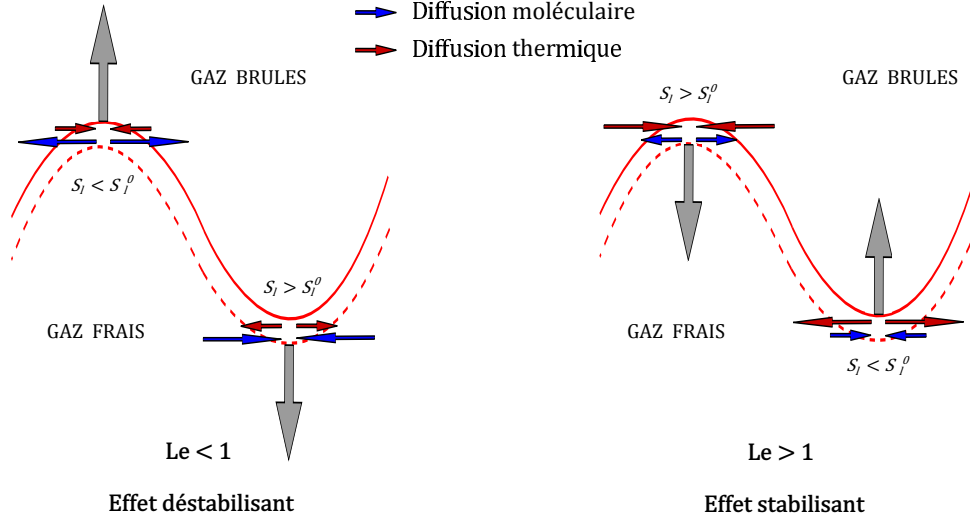


FIGURE 3.8 – Schéma des effets des instabilités thermo-diffusives sur un front de flamme laminaire en fonction du nombre de Lewis.

3.4 Définition des vitesses caractéristiques de flamme étirées

La flamme sphérique 3D réelle diffère de la flamme théorique 1D plane non étirée à cause de l'étirement de son front de flamme et des instabilités qu'il subit. Cette section présente la définition des vitesses de flamme vues au chapitre précédent dans la configuration de flamme SEF. Leur comportement face aux différentes perturbations et le lien avec la vitesse de combustion laminaire S_l^0 sont présentés.

3.4.1 A partir de paramètres cinématiques locaux

3.4.1.1 La vitesse de déplacement et sa relation avec la vitesse de combustion laminaire

La vitesse de déplacement, pondérée par le rapport des densités, permet de définir une vitesse comparable par extrapolation à la vitesse de combustion laminaire S_l^0 [21]. L'expression de cette vitesse, notée \tilde{S}_d , est :

$$\tilde{S}_d = \frac{\rho}{\rho_u} \vec{S}_d = \frac{\rho}{\rho_u} S_d \cdot \vec{e}_r, \quad (3.12)$$

avec u la vitesse des gaz et ρ la densité à l'isotherme locales dans le front de flamme où \tilde{S}_d est mesurée. Notons que par symétrie de la flamme sphérique, l'ensemble des vecteurs sont coplanaires, suivant la direction du vecteur \vec{e}_r . Dans cette expression :

1. S_f est la vitesse de propagation absolue qui s'exprime comme la dérivée temporelle du rayon de flamme :

$$S_f = \frac{dR_f}{dt}, \quad (3.13)$$

avec R_f le rayon défini dans le référentiel du laboratoire qui caractérise la position d'une isotherme contenue dans le front de flamme. Comme pour la flamme 1D, cette vitesse ne dépend pas de la position de mesure dans l'épaisseur de flamme [37].

2. S_d est la vitesse de déplacement, définie sur l'iso-surface T^* contenue dans le front de flamme par :

$$\begin{aligned} S_d &= \frac{1}{|\nabla T|} \left. \frac{DT}{Dt} \right|_{T=T^*}, \\ &= \left(\frac{1}{|\nabla T|} \frac{\partial T}{\partial t} + \vec{u}^* \cdot \frac{\vec{\nabla} T}{|\nabla T|} \right)_{T=T^*}, \\ &= S_f - u|_{T=T^*}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

où $u_{T=T^*}$ représente la vitesse locale des gaz sur l'iso-surface T^* dans un référentiel fixe et extérieur au front.

Attention cependant à ne pas confondre l'équation 3.12 avec l'équation 2.25 exprimée dans une configuration de flamme idéale 1D plane. En effet, la définition de cette vitesse ne diffère pas uniquement par la prise en compte de l'étirement induit en configuration SEF lorsqu'on la compare à la définition 1D plane non étirée. La vitesse \tilde{S}_d est comparable mais pas directement égale à la vitesse de combustion laminaire puisque l'équation : $\rho \cdot u = cste$, définissant la conservation de la masse à travers le front de flamme en géométrie 1D, n'est pas respectée. La figure 3.9 présente superposée sur un même graphique l'évolution du produit $\rho \cdot u$ au travers d'un front de flamme dans les configurations 1D plan et 3D sphérique.

Cette figure issue de simulations numériques démontre que le flux surfacique de masse n'est pas constant à la traversée du front de flamme dans le cas 3D sphérique.

L'équation 3.12, correspondant à la vitesse de déplacement local pondérée par le facteur de densité local, est donc un cas limite asymptotique qui définit une vitesse comparable par extrapolation à étirement nul à la vitesse de combustion laminaire cible S_l^0 .

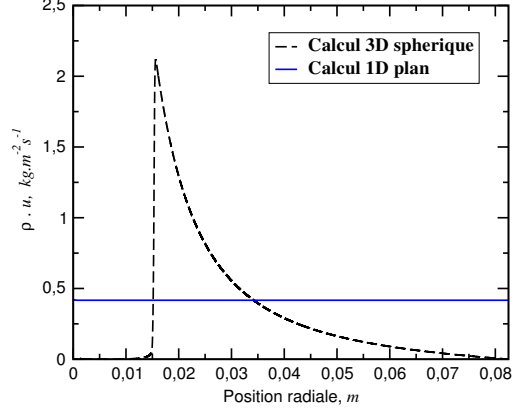


FIGURE 3.9 – Evolution du produit local ρu en fonction de la position d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions NTP, dans le cas idéal 1D plan et réel 3D sphérique.

D'un point de vue pratique, l'Eq. 3.12 est utilisée expérimentalement sur deux isothermes différentes, à chaque extrémité du front de flamme.

1. Sur l'isotherme $T = T_b$, séparant le front de flamme des gaz brûlés. Notée $\tilde{S}_{d,b}$, cette vitesse est définie par :

$$\tilde{S}_{d,b} = \frac{\bar{\rho}_b}{\rho_u} (S_f - u_b), \quad (3.15)$$

avec $\bar{\rho}_b$ le densité moyenne de l'intégralité des gaz brûlés. Ainsi, il est nécessaire de déterminer le rapport des densités pour exprimer fidèlement cette vitesse. Cependant la densité $\bar{\rho}_b$ des gaz brûlés ne peut être mesurée directement sur un dispositif expérimental en configuration SEF. C'est pourquoi classiquement, les gaz brûlés sont supposés homogène spatialement à l'équilibre thermodynamique et au repos, i.e. $u_b = 0$. Ainsi l'Eq. 3.15 prend alors la forme :

$$\tilde{S}_{d,b} \approx \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u} S_f, \quad (3.16)$$

où ρ_b^{eq} est la densité des gaz brûlés estimée à l'aide de solveur d'équilibre chimique adiabatique comme Gaseq [65]. Cette expression est très utilisée expérimentalement car la vitesse de propagation d'un front de flamme sphérique est accessible par de multiples techniques optiques, comme l'ombroscopie ou le tomographie qui seront présentées dans la Partie II. De plus, l'incertitude sur la mesure de cette vitesse de propagation est faible car elle ne dépend pas de l'iso-surface, contenue dans le front de flamme, observée.

Mais l'Eq. 3.16 introduit plusieurs hypothèses qui peuvent conduire à une mauvaise estimation de la vitesse fondamentale de combustion laminaire. En effet, plusieurs récents travaux [66, 67, 68] ont démontré que la densité des gaz brûlés n'est pas forcément celle de l'état d'équilibre adiabatique, ni homogène ou constante au cours de la propagation de la flamme.

2. Sur l'isotherme $T = T_u$, séparant le front de flamme des gaz frais. Notée $\tilde{S}_{d,u}$, cette vitesse ne s'exprime qu'à partir de paramètres cinématiques. En effet, celle-ci ne fait pas intervenir le rapport de densité exprimé dans l'Eq. 3.12 puisqu'il se retrouve égale à 1. On peut donc noter que : $\tilde{S}_{d,u} = S_{d,u}$. Son expression est ainsi :

$$\tilde{S}_{d,u} = S_f - u_g. \quad (3.17)$$

L'exploitation expérimentale de cette dernière définition a été introduite par les travaux de *Balusamy et al.* [69] et étendue par les travaux de *Varea et al.* [70, 42]. Elle est très pertinente pour déterminer la vitesse de combustion laminaire car elle n'introduit aucune hypothèse ou approximation pour faire le lien entre ses définitions mesurable et théorique et est définie par des paramètres mesurables. Dès lors, seul l'introduction d'un modèle d'extrapolation à étirement nul est nécessaire. De plus, comme il sera vu dans la section suivante, cette vitesse n'est pas sujette aux perturbations induites par le rayonnement thermique intrinsèque pendant la propagation de la flamme sphérique (cf Fig. 3.11). Elle présente donc un très fort intérêt pour réaliser des mesures vitesses liées à la LBV, S_l^0 . Cependant, la réalisation de ces mesures nécessite des dispositifs expérimentaux très lourds (cf Chap. 6). Et la longueur de Markstein associée à $S_{d,u}$ (paramètre défini dans la section suivante 3.5 qui caractérise la sensibilité d'une flamme à l'étirement) est très sensible à l'isotherme de mesure dans la zone de préchauffage ce qui rend sa mesure complexe et sujette à de fortes incertitudes [21].

3.4.1.2 L'impact du rayonnement thermique sur les vitesses locales

De nouveaux combustibles et procédés de combustion alternatifs se développent de plus en plus dans l'optique de réduire les émissions de gaz polluants tout en conservant une bonne maîtrise et efficacité de la combustion [71]. On peut citer par exemple les carburants issus de la gazéification de la biomasse, les SynGas (gaz synthétique) ou bien l'oxy-combustion diluée par la recirculation des gaz d'échappement. L'étude de ces nouveaux carburants et procédés

nécessite de plus de nouveaux schémas cinétiques adaptés et validés [72, 73]. Ces types de combustion font appel à des mélanges combustibles qualifiés d'optiquement épais, i.e. contenant une grande quantité d'espèces au fort pouvoir radiatif, comme : H_2O , CO_2 et CO , dans les gaz frais. Il s'établit alors des transferts thermiques radiatifs entre les gaz brûlés et les gaz frais plus importants que pour des mélanges carburant/air classiques. Or les pertes thermiques radiatives sont dominantes dans les mécanismes de limite d'inflammabilité et provoquent des extinctions, des bifurcations ou encore des instabilités du front de flamme [74, 75]. Sur les flammes sphériques, le rayonnement des gaz brûlés ne peut pas être évité de part la topologie de la flamme. De plus, d'après les travaux de *Beeckmann et al.* [76] et de *Jayachadran et al.* [67], les transferts radiatifs ne peuvent être négligés, même loin des limites d'inflammabilité du mélange dilué.

L'étude des effets de l'absorption du rayonnement thermique a été introduit par *Joulin & Deshaies* [77]. A partir d'un modèle de corps gris, ils ont démontré que lorsque l'absorption est prise en compte, il n'existe alors plus de limite d'inflammabilité. Les travaux plus récents de *Ju et al.* [74, 78] à partir d'un modèle de corps non-gris, plus représentatif de la réalité, ont depuis démontré l'existence de cette limite, dirigée par la différence entre les spectres d'émission/absorption des gaz frais et des gaz brûlés. Les transferts radiatifs doivent donc être résolus spectralement. Plusieurs modèles existent pour étudier numériquement le rayonnement. Le modèle le plus fidèle est le modèle statistique par bande (SNB) qui permet de quantifier les émissions et absorptions de rayonnement thermique sur une bande spectrale [79]. Ce modèle est encadré par les deux cas limites :

- le cas adiabatique (ADB), où les transferts radiatifs sont négligés,
- le cas du modèle optiquement mince (OTM), où seul l'émission radiative des gaz brûlés est calculée, i.e. ne prenant pas en compte l'absorption des gaz frais ou la re-absorption des gaz brûlés [80, 66, 7].

Pour modéliser le rayonnement dans les modèles OTM et SNB, un terme est ajouté à l'équation de conservation de l'énergie, exprimée à partir de la température. Ces équations mises en jeu seront présentées avec les outils numériques dans le chapitre 4. Notons simplement que le choix du modèle va avoir un impact significatif sur les résultats des simulations [3] et que l'emploi de modèle radiatif a un coût très élevé en terme de temps de calcul pour ces simulations [68, 5].

Lorsque la flamme se propage, les transferts radiatifs ont deux effets sur la flamme [66] :

1. la diminution de la température des gaz brûlés et l'augmentation de celle des gaz frais. Ces changements imposent donc une modification du rapport de densité σ .

2. la mise en mouvement des gaz brûlés. Leur vitesse, notée u_b , est induite par l'apparition d'un gradient de température au sein des gaz brûlés.

La figure 3.10 extraite de [81] illustre ces changements de température et de vitesse pour une flamme sphérique sur les deux cas limites : adiabatique et optiquement mince. Ces deux effets

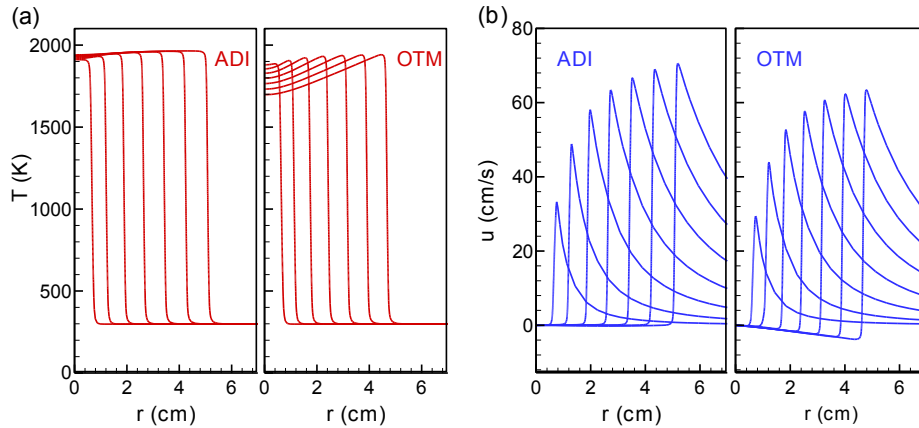


FIGURE 3.10 – Illustration des effets du rayonnement thermique sur la température (a) et la vitesse du fluide (b) d'une flamme CH_4/air aux conditions NTP et $\phi = 1.4$, extrait de [81].

mettent à mal les hypothèses de base de l'Eq. 3.16 classiquement utilisée avec les flammes sphériques. De plus, les deux effets du rayonnement doivent être quantifiés ensemble pour permettre d'estimer la LBV avec l'erreur la plus faible [68]. *Sohn et al.* [3] ont démontré que l'impact de la vitesse u_b est plus important que celui du changement du rapport de densité σ sur la détermination de la vitesse de combustion laminaire. Et *Santner et al.* [68] estiment une réduction de 1 à 7% de la vitesse de combustion à cause du rayonnement thermique. Les travaux de *Yu et al.* ont de plus démontré que l'impact du rayonnement est plus fort pour les flammes s'éloignant de la stoechiométrie et qu'il dépend des conditions thermodynamiques initiales [81]. Ils démontrent aussi que l'intervalle considéré pour l'extrapolation à étirement nul a un impact beaucoup plus faible que le rayonnement sur l'estimation de la LBV. Enfin, les travaux récents de *Jayachandran et al.* [67] ont démontré que l'effet du rayonnement n'est pas le même en fonction de la vitesse de flamme étudiée. La vitesse de propagation absolue, S_f (Eq. 3.13), est influencée par le rayonnement lorsque la flamme est suffisamment développée. Alors que le rayonnement n'a aucun impact sur la vitesse de déplacement, $S_{d,u}$ (Eq. 3.12), définie à l'entrée du front de flamme sur l'isotherme $T = T_u$. Ces résultats sont illustrés sur la figure 3.11 où S_f est notée S_b et $S_{d,u}$ est notée U_n .

Par ailleurs, toutes les études numériques précédemment citées remarquent que les effets ra-

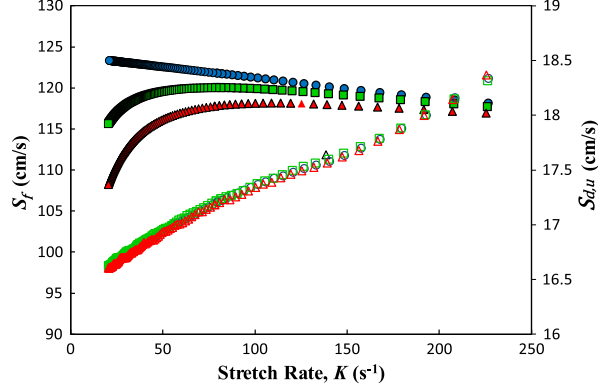


FIGURE 3.11 – Illustration des effets du rayonnement sur la vitesse de propagation et de déplacement d’une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions NTP à partir de trois modèles de rayonnement, extrait de [67]. Les symboles bleus représentent les résultats du modèle adiabatique, les rouges ceux du modèle OTM et les verts un modèle OTM modifié pour se rapprocher d’une flamme réelle.

diatifs augmentent avec la taille de la flamme et la pression initiale. Ainsi, le modèle OTM qui sur-estime les effets du rayonnement est non utilisable pour de forte pression avec des mélanges optiquement épais. Les résultats obtenus à partir de ce modèle doivent donc être analysés avec prudence.

3.4.2 A partir d’un paramètre global : la consommation

La vitesse de combustion laminaire est définie au chapitre précédent comme une grandeur globale liée à la consommation d’une espèce k par une flamme 1D plane non étirée par l’Eq. 2.22. Mais pour prendre en compte la topologie et l’épaisseur du front de flamme dans la configuration de flamme laminaire sphérique, la vitesse de consommation doit être redéfinie pour cette géométrie. *Poinsot & Veynante* [11] définissent la vitesse de consommation moyennée spatialement de l’espèce k , réactive ou produit, pour la configuration SEF par l’équation :

$$\langle S_c \rangle = \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u) R^2} \int_0^{R_0} \dot{\omega}_k r^2 dr, \quad (3.18)$$

avec ρ_u la masse volumique des gaz frais, Y_k^b et Y_k^u respectivement la fraction massique de l’espèce k dans les gaz brûlés et les gaz frais, $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l’espèce k et R_0 le rayon d’intégration du domaine, égal à $+\infty$ si le domaine est ouvert ou égal au rayon de la

cellule en domaine fermé. R est un rayon caractérisant la position du front de flamme. Il n'est pas défini par une isotherme particulière dans cette équation. Notons que par développement asymptotique pour des rayons de flamme R infiniment grand de l'Eq. 3.18, i.e. pour une flamme qui tend vers la configuration plane, l'Eq. 2.22 développée pour une flamme 1D plane est retrouvée.

Cependant, le taux de réaction n'est pas un paramètre mesurable. *Bonhomme et al.* [82] ont développé cette équation pour définir la vitesse de consommation avec des paramètres mesurables expérimentalement. Leur développement repose sur l'équation de conservation de la masse d'une espèce k :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} (\rho (u + V_k) Y_k) = \dot{\omega}_k. \quad (3.19)$$

En intégrant cette équation dans un volume de contrôle sphérique défini tel que $0 < r < R_0$ mène à :

$$\frac{dM_k}{dt} + \underbrace{4\pi R_0^2 \rho_u Y_k(r = R_0) [u(r = R_0) + V_k(r = R_0)]}_{= \text{flux en } R_0} = \int_0^{R_0} \dot{\omega}_k 4\pi r^2 dr \quad (3.20)$$

où M_k est la masse totale de l'espèce k présente dans le domaine d'intégration, telle que $M_k = \int_V \rho Y_k dV$.

En combinant les équations 3.18 et 3.20, la vitesse de consommation moyennée s'exprime pour une espèce k comme :

$$\langle S_{c,k} \rangle = \frac{1}{4\pi \rho_u (Y_k^b - Y_k^u) R^2} \left(\frac{dM_k}{dt} + 4\pi R_0^2 \rho_u Y_k(r = R_0) [u(r = R_0) + V_k(r = R_0)] \right) \quad (3.21)$$

Pour obtenir une équation explicite de $\langle S_{c,k} \rangle$ et supprimer le terme de flux dans son expression, deux développements de l'équation 3.21 sont possibles :

1. Le premier pour un domaine de contrôle ouvert. Il faut alors considérer k comme un produit pour poser $Y_p(r = R_0) = 0$ (tant que la flamme n'a pas atteint les bords du domaine d'intégration) et supprimer le terme de flux.
2. Le second pour un domaine de contrôle fermé (i.e. cellule de mesure). Dans ce cas, $u(r = R_0) = 0$ et $V_k(r = R_0) = 0$ quelle que soit l'espèce (réactive ou produite) considérée.

Dès lors, en considérant le cas réel d'une enceinte fermée, deux nouveaux développements sont possibles : un en prenant k comme un produit et l'autre en prenant k comme un réactif. Ils permettent de définir $\langle S_{c,k} \rangle$, chacun avec un rayon de flamme R_k propre.

1) k =Produit

En considérant une espèce produite, il est possible de définir le rayon de flamme par le rayon équivalent de la sphère contenant l'intégralité de la masse de ce produit :

$$R_p^3 = \frac{M_p}{\frac{4}{3}\pi\bar{\rho}_b Y_{p,b}}, \quad (3.22)$$

où $Y_{p,b}$ est la fraction massique du produit dans les gaz brûlés et $\bar{\rho}_b$ est la densité moyenne (spatiale entre $r = 0$ et $r = R_p$) des gaz brûlés. En combinant les équations 3.21 et 3.22, la vitesse de consommation définie à partir d'une espèce produite, en supposant Y_p^b constante, est :

$$\langle S_{c,p} \rangle = \frac{\bar{\rho}_b}{\rho_u} \frac{dR_p}{dt} + \frac{R_p}{3\rho_u} \frac{d\bar{\rho}_b}{dt}. \quad (3.23)$$

Mais cette expression ne peut être utilisée expérimentalement. En effet, cette équation ne suppose pas que la flamme soit infiniment mince, mais définit son évolution à partir du rayon équivalent R_p . Ainsi le rayon de flamme déterminé sur un dispositif expérimental ne correspond pas nécessairement à R_p . De plus, $\bar{\rho}_b$ et sa dérivée temporelle ne sont pas accessibles expérimentalement.

Dès lors, l'hypothèse d'une flamme infiniment mince : $\frac{\delta_f}{R} \ll 1$ et les hypothèses sur l'état des gaz : $\bar{\rho}_b = \rho_b^{eq}$, $\frac{d\bar{\rho}_b}{dt} = 0$ et $\rho_u = \rho_u^0$ sont introduites. La vitesse de consommation définie à partir d'une espèce produite, Eq. 3.23 peut se mesurer par l'expression

$$\langle S_{c,p} \rangle \approx \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u} \frac{dR_p}{dt}. \quad (3.24)$$

Au final, on peut noter que ce développement redéfinit l'Eq.3.16 vue précédemment à partir de la vitesse de déplacement $\tilde{S}_{d,b}$.

2) k =Réactif

En considérant l'espèce réactive minoritaire r , un autre rayon équivalent est défini comme :

$$R_r^3 = \frac{M_r}{\frac{4}{3}\pi\bar{\rho}_u Y_{r,u}}, \quad (3.25)$$

Comme précédemment, en combinant les équations 3.21 et 3.25, la vitesse de consommation définie à partir d'un réactif est :

$$\langle S_{c,r} \rangle = \frac{dR_r}{dt} - \frac{R_0^3 - R_r^3}{3R_r^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}. \quad (3.26)$$

Enfin, pour exprimer l'évolution de la densité des gaz frais, l'hypothèse de compression isentropique des gaz frais est introduite :

$$\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} = \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}, \quad (3.27)$$

avec γ_u le rapport des capacités calorifiques massique des gaz frais.

L'Eq. 3.26 prend alors la forme :

$$\langle S_{c,r} \rangle = \frac{dR_r}{dt} - \frac{R_0^3 - R_r^3}{3R_r^2} \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}. \quad (3.28)$$

Cette équation, exprimée côté gaz frais, ne fait pas intervenir de rapport de densité contrairement à l'Eq. 3.24. De plus la propagation du front de flamme est caractérisée par deux rayons différents dans ces équations : R_p et R_r ; respectivement définis par la masse du produit et la masse du réactif considéré. Dans leur étude numérique, *Bonhomme et al.* ont considéré que la différence entre ces deux rayons est certainement indéterminable à partir de dispositifs expérimentaux et aboutit à la conclusion : $R_p = R_r = R_f$ soit une égalité parfaite des vitesses de propagation absolue $\frac{dR_p}{dt} = \frac{dR_r}{dt} = \frac{dR_f}{dt} = S_f$.

3.5 L'extrapolation à étirement nul

Les différentes vitesses mesurables expérimentalement et définies précédemment sont reliées à la vitesse de combustion laminaire par l'étirement de la flamme, tel que :

$$S_l^0 = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \tilde{S}_d = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \langle S_c \rangle. \quad (3.29)$$

Ainsi, cette relation signifie que chacune des vitesses mesurables doit définir à étirement nul une seule et même valeur : la vitesse fondamentale de combustion laminaire. Toutes les vitesses définies sont donc théoriquement égales à étirement nul. L'extrapolation des mesures à étirement nul peut être effectuée par différents modèles asymptotiques en fonction du combustible et des conditions thermodynamiques étudiées. La section suivante présente les deux principaux, dédiés aux flammes en expansion sphérique.

3.5.1 Les modèles d'extrapolation

Markstein [52] fut le premier à proposer une relation entre la vitesse de flamme étirée et la courbure locale pour exprimer la vitesse de combustion laminaire, S_l^0 , sous la forme linéaire : $S_{d,b} = S_l^0 - \ell_{d,b} \mathcal{H}_{coubure}$. Plus tard, elle fut généralisée à l'étirement total pour donner la relation :

$$S_{d,b} = S_{d,b}^0 - \ell_{d,b} \kappa, \quad (3.30)$$

où $\ell_{d,b}$ est une longueur caractéristique associée à la vitesse de déplacement $S_{d,b}$, nommée longueur de Markstein, qui rend compte de la sensibilité de la flamme à l'étirement. Cette relation

linéaire a été confirmée par les études théoriques de *Clavin et al.* [83, 84, 64] et de *Matkovsky & Matalon* [85] basées sur un développement asymptotique des équations de conservation pour des flammes faiblement étirées (i.e. $\frac{S_{d,b}}{S_l^0} \approx 1$) tel que le rayon de flamme soit largement supérieur à l'épaisseur de flamme, i.e. $\frac{R_f}{\delta_f} \gg 1$, la limite de flamme quasi-plane.

Notons que dans de nombreux travaux, la vitesse de déplacement étudiée est la vitesse de l'isotherme séparant le front de flamme des gaz brûlés. En effet, elle s'identifie à la vitesse de propagation absolue du front de flamme S_f en faisant l'hypothèse que les gaz brûlés sont au repos. La longueur de Markstein ℓ_b , associée à S_f , est alors identifiée comme la grandeur caractéristique informant au mieux sur la sensibilité de la flamme à l'étirement [21].

Enfin, cette relation linéaire entre une vitesse étirée mesurée à partir d'une flamme réelle et la vitesse à étirement nul peut aussi être utilisée avec la vitesse de consommation S_c , définissant alors la longueur de Markstein associée ℓ_c .

Par ailleurs, cette relation linéaire (Eq. 3.30) peut s'exprimer sous la forme adimensionnée :

$$\frac{S_{d,b}}{S_l^0} = 1 - Ma_{d,b} Ka_L, \quad (3.31)$$

avec $Ma_{d,b}$ le nombre de Markstein et Ka_L le nombre de Karlovitz laminaire, définis respectivement par :

$$Ma_{d,b} = \frac{\ell_{d,b}}{\delta_p} \quad (3.32) \quad Ka_L = \frac{\delta_p \kappa}{S_l^0} \quad (3.33)$$

où δ_p est l'épaisseur de la zone de préchauffage définie par l'Eq. 2.15.

Cependant les études plus récentes de *Kelley & Law* [86, 87], *Halter et al.* [88] ou encore *Chen* [89] ont soulignées les limites du modèle linéaire (Eq. 3.30) et préconisent l'emploi de la relation non-linéaire définie à partir des équations de conservation et des hypothèses suivantes :

- l'épaisseur de flamme est négligeable devant son rayon ; $\delta_f \ll R_f$,
- les gaz (frais et brûlés) sont considérés parfait et au repos,
- l'énergie d'allumage déposé dans le milieu n'est pas prise en compte,
- l'énergie d'activation est élevée (i.e. $E_{activation} \gg RT$),
- la combustion est isobare et adiabatique (i.e. les transferts de chaleur sont négligés),

dont l'équation est :

$$\tilde{s}^2 \ln \tilde{s}^2 = -2\tilde{\sigma}, \quad (3.34)$$

avec $\tilde{s} = S_i/S_i^0$ où S_i peut être la vitesse : S_d , S_f ou $\langle S_c \rangle$ et $\tilde{\sigma} = \frac{\ell_i \kappa}{S_i^0}$ où ℓ_i est la longueur de Markstein associée à la vitesse S_i .

Halter et al. [88] ont démontré que l'utilisation de la relation linéaire (Eq. 3.30) comparée à la relation non linéaire (Eq. 3.34) peut introduire une erreur allant jusqu'à 10% sur la valeur estimée de la vitesse de flamme laminaire pour des mélanges combustibles : iso-octane/air et méthane/air en condition riche. Cet écart est illustré sur la figure 3.12 extraite de leurs travaux [88].

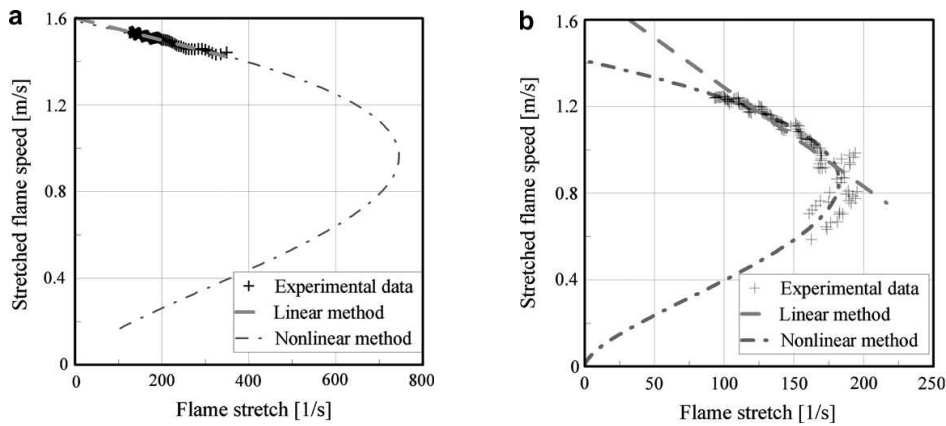


FIGURE 3.12 – Evolution de la vitesse de propagation en fonction de l'étirement et son extrapolation linéaire et non-linéaire de flammes CH_4/air à $P = 1$ bar, $T = 300$ K pour les richesses : (a) $\phi = 0.8$ et (b) $\phi = 1.3$; extrait de [88].

Une méthode complète pour implémenter cette équation non-linéaire dans un post-traitement de données expérimentales est proposée par *Kelley & Law* [87]. Notons aussi qu'à partir de la relation non linéaire, Eq. 3.34, il est possible de redéfinir la relation linéaire, Eq. 3.30, en appliquant un développement limité de l'opérateur ' \ln ' dans la limite où le rayon de flamme est grand (i.e. $R_f \gg 1$ ou $R = \frac{R_f}{\delta_f} \gg 1$) et la flamme peu étirée comme démontré par *Chen* [89] à partir des travaux théoriques de *Ronney & Sivashinsky* [90] et de *Bechtold et al.* [91]. L'équation 3.34 peut alors être vue comme une extension du modèle linéaire pour des flammes fortement influencées par l'étirement. Cette égalité des équations est démontrée sur la figure 3.13 extraite de [86], où les deux modèles présentent des évolutions différentes sauf pour de faible valeur de $|\tilde{\sigma}|$. Au final, ce graphique démontre l'importance d'accorder les hypothèses de base

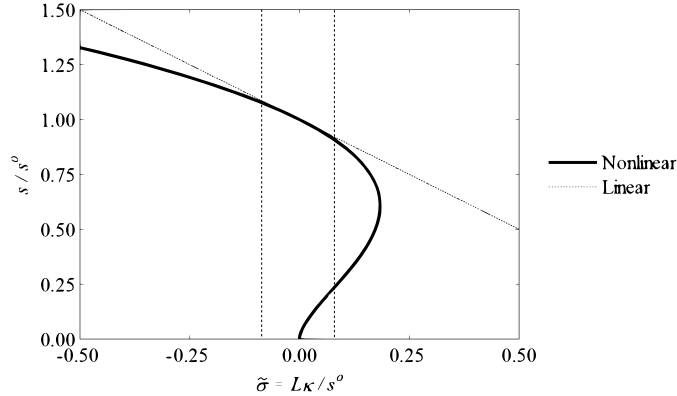


FIGURE 3.13 – Comparaison des modèles d'extrapolation à étirement nul linéaire et non-linéaire en fonction du nombre $\tilde{\sigma}$, extraite de [86].

du développement d'un modèle avec les conditions expérimentales des points de mesure pour permettre une extrapolation à étirement nul valide. Par ailleurs, *Chen* [89] a démontré que ces deux modèles sont fortement influencés par le nombre de Lewis du mélange et doivent être utilisés avec attention.

3.5.2 La sensibilité à l'étirement et le nombre de Lewis du mélange : approche asymptotique avec la théorie hydrodynamique

Trois vitesses caractéristiques d'une flamme de prémélange ont été définies au chapitre précédent dans la section 2.5 : la vitesse de consommation moyennée spatialement $\langle S_c \rangle$ et les vitesses de déplacement $\tilde{S}_{d,b}$ et $\tilde{S}_{d,u}$. Afin de pouvoir estimer l'impact de l'étirement sur ces vitesses, le cas limite défini par la théorie asymptotique hydrodynamique est utilisé. La description de la flamme par l'approche hydrodynamique fut introduit par *Matkowski & Matalon* [85] et généralisée quelles que soient la richesse, la dépendance à la température des coefficients de transport et l'ordre de la réaction chimique par *Matalon et al.* [92]. Le front de flamme est assimilé à une surface libre infiniment mince où s'observe une discontinuité des propriétés physiques et définie par la fonction $F(x, t) = 0$ dans la direction $n = \nabla F / |\nabla F|$ pointant vers les gaz frais, tel que $F > 0$ correspond aux gaz frais et $F < 0$ correspond aux gaz brûlés.

Dans cette configuration, le nombre de Markstein, initialement défini dans l'équation 3.31, peut être déterminé pour ces trois vitesses.

1. **En considérant la vitesse de consommation**, le nombre de Markstein associé est d'après *Bechtold & Matalon* [63] :

$$Ma^c = \frac{\ell_c}{\delta_p} = \frac{\beta (Le_{eff} - 1)}{2(\sigma - 1)} \int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} \ln \left(\frac{\sigma - 1}{\chi - 1} \right) d\chi \quad (3.35)$$

Dans ce cas, la valeur critique du nombre de Lewis qui modifie le signe du nombre de Markstein est : 1.

2. **En considérant la vitesse absolue** S_f (équivalent à la vitesse $S_{d,b}$ lorsque les gaz brûlés sont supposés au repos, i.e. $u_b = 0$) associée à l'isotherme des gaz brûlés supposés au repos en $F = 0^-$:

$$Ma^{d,b} = \frac{\ell_{d,b}}{\delta_p} = \frac{1}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} d\chi + \frac{\beta (Le_{eff} - 1)}{2(\sigma - 1)} \int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} \ln \left(\frac{\sigma - 1}{\chi - 1} \right) d\chi, \quad (3.36)$$

où $\sigma = \rho_u/\rho_b$ est le facteur d'expansion, $\lambda(\chi) = \frac{\lambda}{\chi}$ représente la conductivité thermique du mélange avec $\chi = \frac{T}{T_u}$, β est le nombre de Zeldovich et Le_{eff} le nombre de Lewis effectif du mélange. Ce nombre de Lewis particulier est issu des travaux de *Bechtold & Matalon* [63] et sera présenté en détail dans la section 3.3.3.

L'équation 3.36 permet de définir un nombre de Lewis critique à partir duquel le nombre de Markstein associé à la vitesse absolue change de signe :

$$Le_c^b = 1 - \frac{2}{\beta} \frac{\int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} d\chi}{\int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} \ln \left(\frac{\sigma - 1}{\chi - 1} \right) d\chi} \quad (3.37)$$

Dans le cas où le mélange est fortement non-équidiffusif, comme pour les flammes d'hydrogène, des valeurs du nombre de Lewis inférieures à ce nombre Le_c^b peuvent être atteintes et aboutir à des longueurs de Markstein négatives. Mais pour la majeure partie des mélanges hydrocarbure/air, le nombre de Markstein associé à l'isotherme des gaz brûlés est positif [93, 94]. Cette observation peut être étendue au-delà de la théorie hydrodynamique des flammes infiniment minces [21]. *Law & Sung* [95] ont proposé une synthèse de l'effet de l'étirement sur la vitesse de propagation. Comme il vient d'être montré par la théorie, leur étude numérique a démontré que dans le cas d'un étirement positif, caractéristique notamment des flammes sphériques en expansion libre, un accroissement de l'étirement provoque une augmentation (diminution) de la vitesse fondamentale de propagation de flamme pour un mélange dont le nombre de Lewis est inférieur (supérieur) à Le_c^b .

Notons qu'en considérant la conductivité thermique constante dans tout le domaine, i.e.

$\lambda(\chi) = 1$, l'expression du nombre de Markstein peut être simplifiée par :

$$Ma^{d,b} = \frac{\ell_{d,b}}{\delta_p} = \frac{\ln(\sigma)}{\sigma - 1} + \frac{\beta (Le_{eff} - 1)}{2(\sigma - 1)} \int_1^\sigma \frac{\ln \xi}{\xi - 1} d\xi. \quad (3.38)$$

3. **En considérant la vitesse de déplacement $S_{d,u}$, associée à l'iso-surface des gaz frais** (équivalent à $\tilde{S}_{d,u}$ car le facteur d'expansion vaut localement 1) en $F = 0^+$ par la théorie hydrodynamique, il est défini comme :

$$Ma^{d,u} = \frac{\ell_u}{\delta_p} = \frac{\sigma}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} d\chi + \frac{\beta (Le_{eff} - 1)}{2(\sigma - 1)} \int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} \ln \left(\frac{\sigma - 1}{\chi - 1} \right) d\chi. \quad (3.39)$$

Le nombre de Lewis critique prend alors la forme :

$$Le_c^{d,u} = 1 - \frac{2\sigma}{\beta} \frac{\int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} d\chi}{\int_1^\sigma \frac{\lambda(\chi)}{\chi} \ln \left(\frac{\sigma - 1}{\chi - 1} \right) d\chi} \quad (3.40)$$

Mais le nombre de Markstein ainsi défini par cette théorie asymptotique n'est pas forcément égal au nombre de Markstein à l'isotherme $T = T_u$ qui définit l'entrée des gaz frais dans un front de flamme non infiniment mince. Lorsque l'épaisseur de flamme est considérée, le nombre de Lewis du mélange n'est pas le seul facteur influent sur l'estimation du nombre de Markstein. La sensibilité à l'étirement de la vitesse de déplacement dans la zone de préchauffage dépend aussi de l'isotherme où elle est mesurée [21]. Cette particularité, qui ne peut pas être représentée à l'aide du développement asymptotique hydrodynamique sous cette forme, sera présentée plus en détail dans la section suivante.

Pour ces trois vitesses, leurs sensibilités par rapport à l'étirement, exprimées à partir du nombre de Markstein, sont directement liées aux instabilités thermo-diffusives caractérisées par le nombre de Lewis du mélange [85]. La longueur de Markstein change de signe pour une valeur critique du nombre de Lewis propre à chacune de ces vitesses, comme répertorié dans le tableau 3.1, telle que pour des valeurs positives du nombre de Markstein la vitesse diminue avec l'étirement et inversement pour des valeurs négatives.

Notons que *Matalon & Matkowsky* [85] ont également démontré l'influence du nombre de Lewis du mélange sur la température finale des gaz brûlés T_b par l'équation :

$$\frac{T_b - T_{ad}}{T_b} = \left(\frac{1}{Le_{eff}} - 1 \right) \frac{D_{th}}{S_l^0} \kappa. \quad (3.41)$$

Cette équation exprime que pour un mélange avec un nombre de Lewis inférieur à 1, la température des gaz brûlés sera supérieure à la température adiabatique et inversement pour un mélange caractérisé par un nombre de Lewis supérieur à 1.

Le	$\ell_{d,b}$	ℓ_c
0	-	-
Le_c	0	-
1	+	0
∞	+	+

TABLE 3.1 – Signe du nombre de Markstein en fonction du nombre de Lewis, évalué par la théorie asymptotique hydrodynamique.

3.5.3 La sensibilité à l'étirement et la vitesse de déplacement

La section précédente a démontré dans les limites de la théorie hydrodynamique que les vitesses de flamme n'avaient pas une sensibilité à l'étirement identique. Pour la vitesse de propagation absolue $S_{d,b}$ et la vitesse de consommation $\langle S_c \rangle$, l'analyse proposée est suffisante car leur valeur n'est pas associée à une iso-surface (ou isotherme) spécifique dans le front de flamme. En effet, plusieurs études comme celles de *Bradley et al.* [37] ou *Giannakopoulos et al.* [21], ont montré que la vitesse absolue peut être considérée constante à travers le front de flamme. Elle ne dépend donc pas d'une isotherme de mesure. Et la vitesse de consommation est un paramètre intégré dans tout le domaine. Mais la vitesse de déplacement S_d est quant à elle dépendante de l'isotherme considérée pour la déterminer lorsque la flamme est considérée épaisse.

Giannakopoulos et al. [21] ont étudié numériquement l'évolution de la longueur de Markstein associée à la vitesse de déplacement, ℓ_d , en fonction de la position dans le front de flamme. Leurs résultats sont présentés sur la figure 3.14. Ils démontrent une forte dépendance de ℓ_d en fonction de l'isotherme considérée. Un changement de signe est observable tel que ℓ_d est négative pour une isotherme proche des gaz frais et positive pour une isotherme proche des gaz brûlés. Ils montrent aussi que la valeur de ℓ_d est très variable et change de signe dans la zone de préchauffage définie entre les isothermes normalisées $T^* = 1.01$ et $T^* = 4$. Alors qu'elle converge vers une même valeur dans la zone de réaction définie entre $T^* = 4$ et $T^* = 7.5$, correspondant à la longueur de Markstein associée aux gaz brûlés : ℓ_b . Et ce quelle que soit la richesse du mélange. Cette évolution n'est pas non plus dépendante de la chimie car elle a été confirmée qualitativement quel que soit le schéma cinétique adopté (une chimie à une étape ou un schéma cinétique détaillé). En revanche, la valeur de ℓ_d est dépendante du schéma cinétique d'après leurs calculs. Par ailleurs, ils ont étendu l'approche asymptotique hydrodynamique dans la zone

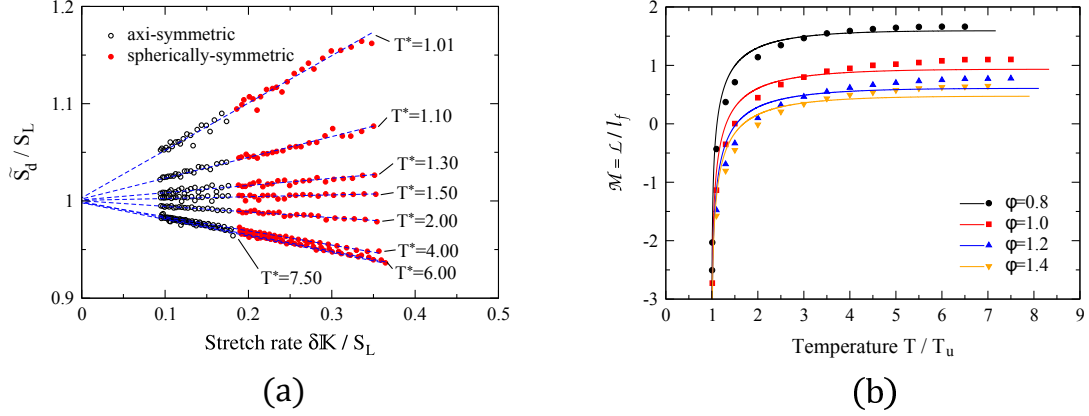


FIGURE 3.14 – Evolution de la vitesse de déplacement normalisée en fonction de l'étirement adimensionné pour différentes isothermes $T^* = \frac{T}{T_u}$ (a) et du nombre de Markstein associé à la vitesse de déplacement en fonction de la température adimensionnée T^* (b), d'une flamme stoechiométrique de propane/air à $T = 298K$ et $P = P_{atm}$, extrait de [21].

de préchauffage pour exprimer la longueur de Markstein associée à la vitesse de déplacement, notée ℓ^* , comme :

$$\ell^* = \ell_{d,b} - \delta_f \left(\frac{\sigma - 1}{\sigma} \int_{\theta^*}^{\sigma} \frac{\lambda(\chi)}{\chi - 1} d\chi - \int_{\theta^*}^{\sigma} \frac{\lambda(\chi)}{\chi} d\chi \right). \quad (3.42)$$

Au final, leur étude numérique préconise l'utilisation d'une isotherme proche des gaz brûlés pour estimer la vitesse de déplacement et la longueur de Markstein associée. Cependant, la masse volumique et la vitesse locale du fluide ne sont pas disponibles expérimentalement et il est nécessaire d'introduire des hypothèses et modèles pour les estimer.

La méthode adoptée généralement est de se placer sur l'isotherme des gaz brûlés et de supposer :

- le fluide au repos pour assimiler la vitesse de déplacement à la vitesse de propagation absolue, simple à mesurer,
- les gaz brûlés à l'équilibre chimique adiabatique.

Ainsi : $u = 0$ et $\rho_{locale} = \rho_b^{eq}$, tel que ρ_b^{eq} est classiquement calculée à partir de solveur cinétique. L'équation 2.29, exposée au chapitre précédent, est alors retrouvée et utilisée pour exprimer S_f^0 dans cette configuration de flamme.

Enfin, il faut noter que même si théoriquement : $S_{d,b}^0 = \frac{\rho}{\rho_u} S_f^0$, une relation simple de ce type n'existe pas entre leurs longueurs de Markstein associées : $\ell_d \neq \frac{\rho}{\rho_u} \ell_{d,b}$. En effet, la figure 3.15, extraite de [96], démontre que les nombres de Markstein : $Ma' = \frac{\rho_b}{\rho_u} Ma^{d,b}$ et Ma^d sont clairement différents dans le front de flamme. Dès lors, les relations existantes entre les vitesses de flamme

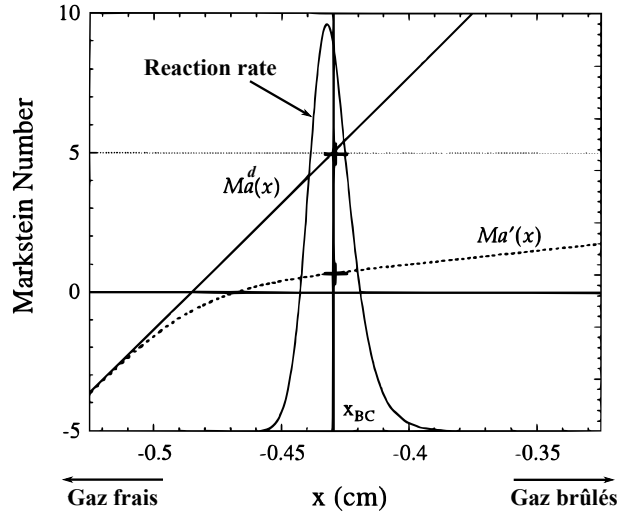


FIGURE 3.15 – Evolution de la vitesse de déplacement normalisée en fonction de l’étirement adimensionné pour différentes isothermes $T^* = \frac{T}{T_u}$, d’une flamme stoechiométrique de propane/air $T = 298K$ et $P = P_{atm}$, extrait de [21].

ne s’appliquent pas à leurs longueurs de Markstein respectives et la mesure de la longueur de Markstein doit être propre à chaque vitesse.

3.5.4 La structure de flamme et l’étirement

Les travaux de *Law et al.* [97] puis de *Sung et al.* [98] ont montré que pour un mélange équidiffusif, la structure du front de flamme laminaire de prémélange est peu influencée par l’étirement. En effet, d’après [98] pour une flamme laminaire de prémélange stoechiométrique CH_4/air les profils de température et donc l’épaisseur au sens de Spalding δ_{th} ne sont que peu influencés. En revanche, cette observation n’est pas vraie pour des mélanges non-équidiffusifs. La figure 3.16 présente aussi la superposition des profils de température pour différentes valeurs de l’étirement d’une flamme C_3H_8/air à $\phi = 0.81$, correspondant à un mélange dont le nombre de Lewis est supérieur à 1 et d’une flamme H_2/air à $\phi = 0.35$ représentant les mélanges au nombre de Lewis inférieur à 1. Pour la flamme pauvre de propane, cette figure montre un impact plus marqué de l’étirement, notamment sur le gradient de température, tel que la flamme est épaissie par l’étirement. Pour la flamme d’hydrogène, cet impact est encore plus marqué mais provoque sur celle-ci un amincissement du front de flamme avec l’étirement.

Néanmoins, ces mesures ont été effectuées sur des flammes à contre-courant dont les étirements sont très intenses. Sur une flamme en propagation sphérique libre, la gamme d’étirement obser-

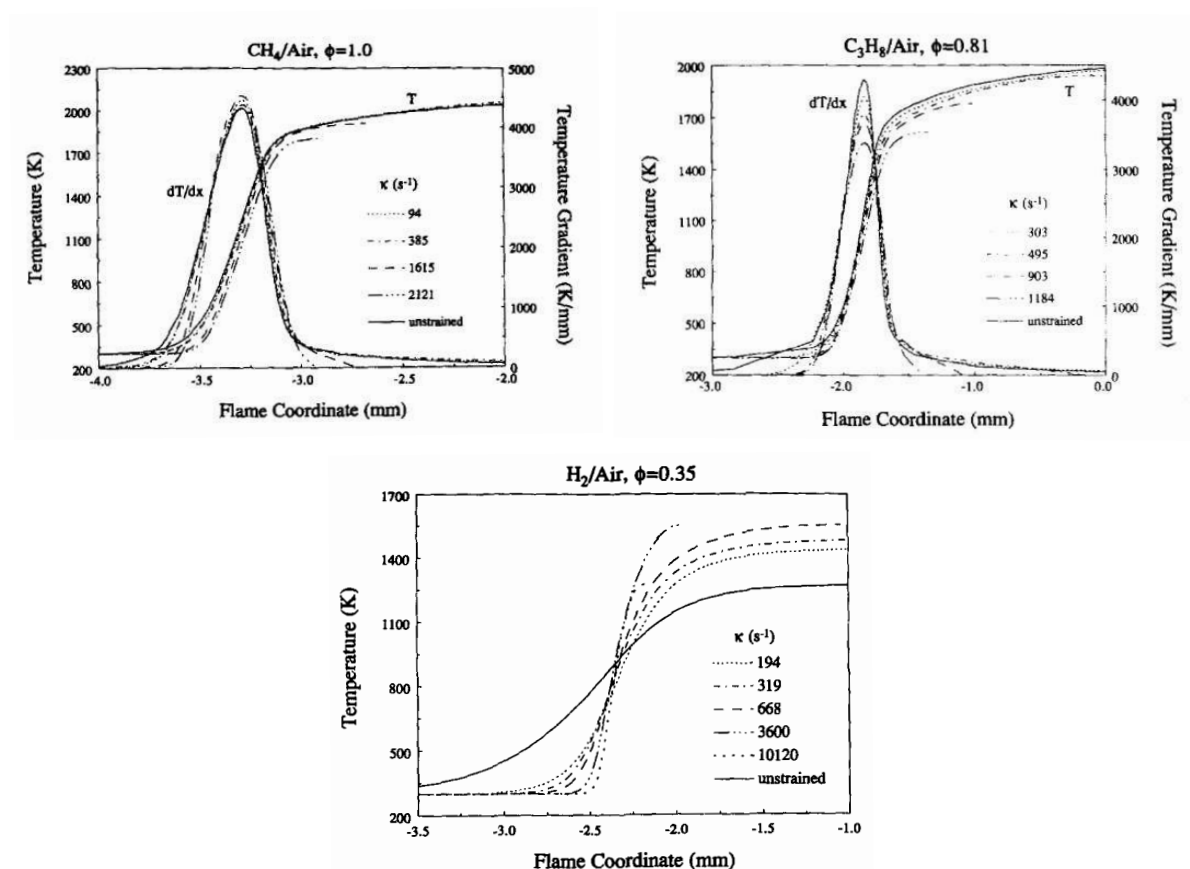


FIGURE 3.16 – Profils de température mesurés en configuration de flamme à jets opposés pour différentes valeurs d'étirement sur des flammes : CH_4/air ($Le \approx 1$), C_3H_8/air ($Le > 1$) et H_2/air ($Le < 1$), dans les conditions NTP, extraite de [98].

vale est bien plus faible.

Expérimentalement, la valeur maximale de l'étirement traitée dans les mesures présentées dans ce manuscrit sera atteinte pour un flamme H_2/air à $800 s^{-1}$. De plus, d'après les résultats de la figure 3.16, la variation de l'épaisseur de flamme est faible pour ces trois carburants entre 200 et $800 s^{-1}$. *Groot & de Goey* [99] ont démontré pour les flammes en expansion et implosion sphérique comme cylindrique que la variation de l'épaisseur de flamme est non négligeable aux premiers instants de propagation de la flamme, puis atteint une valeur quasi constante, comme illustré sur la figure 3.17 extraite de leurs travaux.

Au final, il sera considéré dans la suite de cette étude que la variation d'épaisseur de flamme peut être négligée pour les gammes de rayons considérés.

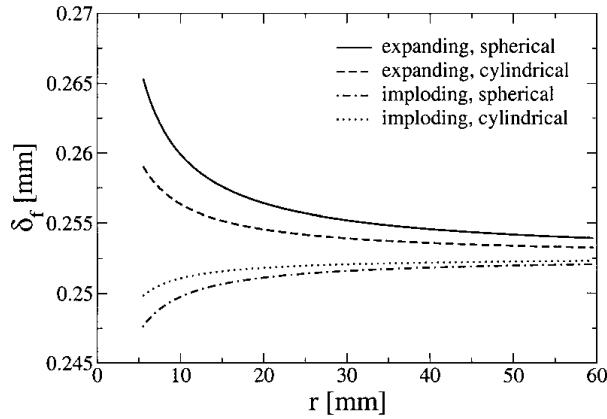


FIGURE 3.17 – Evolution de l'épaisseur de flamme en fonction du rayon de flamme pour différentes configurations d'une flamme CH_4/air aux conditions NTP, extraite de [99].

3.5.5 Conclusion sur l'extrapolation de l'étirement

En somme, l'extrapolation à étirement nul et la caractérisation de la sensibilité d'une vitesse de flamme à l'étirement à travers la mesure expérimentale de la longueur (ou nombre) de Markstein ne sont pas triviales. En fonction de la vitesse étudiée, les valeurs de la longueur de Markstein associée sont différentes, non proportionnelles et peuvent être de signe opposé.

De plus, elles sont fonctions du modèle d'extrapolation employé. Il ne s'agit donc pas d'un paramètre universel et simple à étudier. La relation utilisée doit être sélectionnée en fonction des caractéristiques du mélange combustible pour un intervalle de points en accord avec les hypothèses de celle-ci. La définition d'un intervalle de mesure exploitable sera vue en détail dans la section 3.6. Notons que *Wu et al.* [100] ont défini un intervalle où l'extrapolation est possible sans induire d'erreurs supérieures à l'erreur de mesure par la relation :

$$-0.05 < MaKa_L < 0.15, \quad (3.43)$$

avec Ma le nombre de Markstein exprimé à partir de la relation linéaire 3.31 et Ka_L le nombre de Karlovitz laminaire. C'est un nombre sans dimension défini par :

$$Ka_L = \frac{\kappa \delta_p}{S_f^0}. \quad (3.44)$$

3.6 L'intervalle de mesures exploitables

Toutes les équations développées au chapitre précédent reposent sur de nombreuses hypothèses quant à l'état du front de flamme ou l'état thermodynamique des gaz qui ont un impact sur la détermination de la vitesse de combustion. De plus, les mesures expérimentales sont influencées par différents paramètres extérieurs à la flamme qui peuvent être en désaccord avec ces hypothèses. L'exploitation de ces données expérimentales pour déterminer avec précision la LBV ne pourra se faire qu'à partir d'un intervalle de mesure libre de toute influence extérieure.

3.6.1 L'impact de l'allumage : une borne inférieure

Toutes les études, quelles soient théoriques [101, 102, 103], numériques [37, 102, 104] ou expérimentales [102, 105, 106] ont démontré que l'allumage a un impact sur les premiers instants du développement de la flamme en SEF quel que soit le carburant étudié. Cet impact se caractérise par un rayon à partir duquel la flamme se propage sans effet mémoire de l'allumage, noté R_{fL} . Initialement, le noyau de flamme créé par l'allumage a une vitesse de propagation très élevée qui décroît fortement [107]. Selon l'énergie apportée par l'étincelle, le noyau va soit se développer et laisser place à une flamme sphérique se propageant librement, soit s'éteindre. Mais l'allumage a un effet mémoire sur la flamme jusqu'à un rayon critique où quelle que soit l'énergie apportée à l'allumage la vitesse de propagation est la même, comme illustré sur la figure 3.18 extraite de [7]. *Bradley et al.* [37] suggèrent dans leur étude numérique sur des flammes stoechiométriques CH_4/air à $T = 300 K$ et $P = 100 kPa$, qu'un rayon $R_{fL} = 6 mm$ permet de se soustraire des effets d'allumage quels qu'ils soient. *Chen* [7] a élargi cette étude à deux autres richesses, une pauvre : $\phi = 0.8$ et une riche : $\phi = 1.4$. Ces résultats, présentés dans la figure 3.18, démontrent que la valeur du rayon R_{fL} augmente avec la richesse pour les flammes de CH_4/air . De plus, *Chen & Burke* [102] ont démontré que pour des mélanges définis par un nombre de Lewis fortement supérieur à 1 (flammes H_2/air pour des richesses : $\phi > 3.0$) ou des conditions sub-atmosphériques, l'énergie d'allumage nécessaire est plus forte. Ce qui implique une valeur du rayon R_{fL} plus importante pour se soustraire des effets de l'allumage. Il présente aussi une évolution différente du rayon R_{fL} en fonction de la richesse pour les flammes H_2/air (Cf. Fig.4 de [102]). Ces différentes études montrent au final que ce rayon minimum R_{fL} doit être ajusté pour chaque mélange. Pour traiter des données expérimentales sans introduire d'erreurs, il sera surestimé à $10 mm$ quel que soit le mélange étudié dans ce manuscrit.

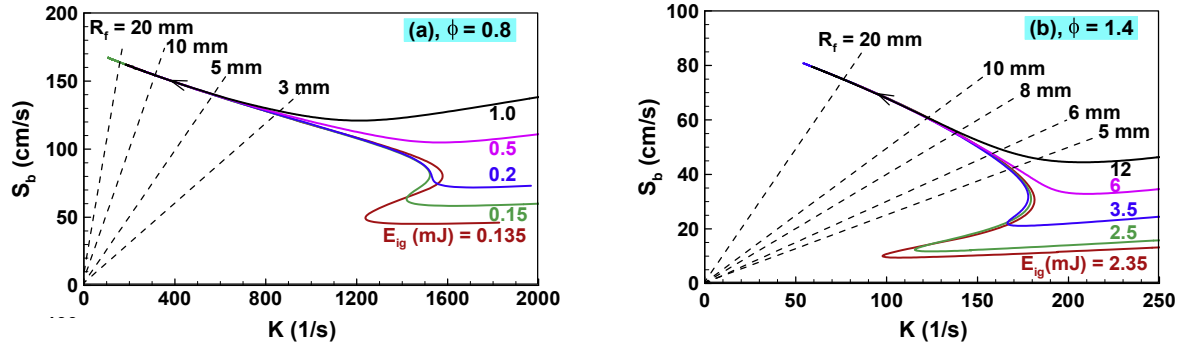


FIGURE 3.18 – Effet de l'énergie déposée à l'allumage sur la vitesse de propagation d'une flamme SEF aux conditions NTP, extrait de [7].

Il faut noter pour conclure que les flammes sphériques à très faibles rayons ($R_f < 5 \text{ mm}$) sont tout de même étudiées pour caractériser les phénomènes physiques en méso-combustion, i.e. " un régime de combustion dont la taille caractéristique est proche de la distance d'extinction ¹ mais supérieur à 1 mm [108]. La flamme a dans ces conditions un caractère fortement non-linéaire en fonction des paramètres fondamentaux.

3.6.2 L'impact du confinement et des instabilités intrinsèques à l'écoulement : une borne supérieure

Lors de la combustion d'un prémélange dans une enceinte close à volume constant, l'élévation de pression et de température est faible au cours des premiers instants du développement de la flamme. La flamme peut donc être considérée comme dépendant uniquement de l'étirement après soustraction des effets d'allumage. Cependant, au fur et à mesure qu'elle se propage, une augmentation de pression va pouvoir s'observer dans la cellule et va provoquer la mise en mouvement des gaz brûlés dans le sens opposé à la propagation du front de flamme et un changement des conditions thermodynamiques [109, 110, 82, 66]. La vitesse caractéristique du front de flamme est modifiée par ces effets, quelle que soit la définition employée comme démontré sur la figure 3.19 extraite de [110]. Cette figure présente la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$, Eq. 3.15, normalisée par la vitesse de combustion laminaire S_l^0 sans correction du mouvement des gaz brûlés, avec correction de ce mouvement et enfin avec correction du mouvement et de l'état thermodynamique des gaz. Ces effets dus au confinement sont soustraits par l'introduction d'une limite haute : le rayon de

1. La distance d'extinction, ou de 'quenching', est une distance caractéristique à une paroi à partir de laquelle une flamme se propageant vers cette paroi s'éteint.

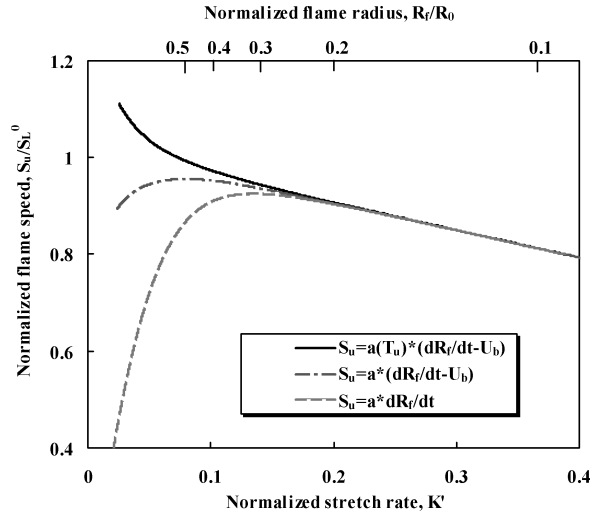


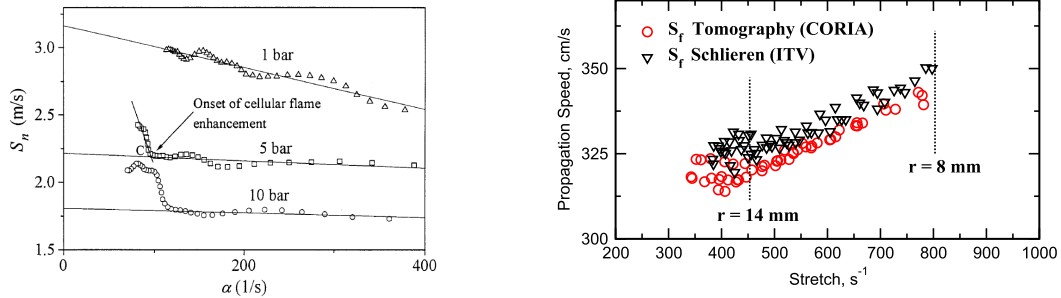
FIGURE 3.19 – Evolution de la vitesse absolue normalisée et de la vitesse de déplacement à l’isotherme des gaz brûlés d’une flamme CH_4/air , extrait de [110]. Dans cette figure $\tilde{S}_{d,b}$ est représentée par la variable S_u .

flamme R_{fU} à partir duquel des modifications de la propagation de flamme sont perçues. Il est défini par de nombreuses études [7, 111, 110, 112] par rapport à la taille de la cellule de mesure, quelle soit proche d’une géométrie interne sphérique ou même cylindrique. En assimilant la cellule à une sphère de rayon interne $R_0 = (3V/4\pi)^{1/3}$, les effets du confinement sont négligeables si $\frac{R_f}{R_0} < 25\%$, soit un rayon limite : $R_{fU} = 0.25 R_0$. Notons que pour la géométrie cylindrique, *Burke et al.* [110] ont démontré que l’impact n’est pas dû à un effet de confinement mais à la mise en place d’un écoulement à cause de la favorisation de la propagation dans la direction axiale comparée à la direction radiale.

De plus, cette limite haute doit aussi prendre en compte l’apparition des cellularités sur le front de flamme qui peuvent apparaître avant les effets de confinement dans la cellule. Elles sont provoquées par les instabilités hydrodynamiques et thermo-diffusives se développant lorsque la flamme se propage et se traduisent par une augmentation de la surface de flamme et donc de la vitesse de flamme. Ces instabilités sont dépendantes des conditions thermodynamiques et du mélange, telles que :

- pour les mélanges dont le nombre de Lewis est supérieur à 1, les cellularités apparaissent avant les effets de confinement lorsque la pression initiale augmente, comme démontré sur la figure 3.20(a), extraite de [113],

- et pour les mélanges dont le nombre de Lewis est inférieur à 1, les cellularités peuvent apparaître avant les effets du confinement à cause des instabilités thermo-diffusives prédominantes pour ces mélanges. *Varea et al.* [44] définissent dans leurs récents travaux un rayon $R_{fH} = 1.4 \text{ cm}$ pour une flamme H_2/air à $\phi = 0.5$ dans les conditions atmosphériques.



(a) Cellularités induites avec la pression sur un même intervalle de mesure observé [113]. (b) Cellularités induites par les effets thermo-diffusifs [44].

FIGURE 3.20 – Effet de la cellularité du front de flamme sur la vitesse de propagation absolue.

Pour conclure, la figure 3.21, extraite de [87], présente l'évolution temporelle du rayon de flamme et sa vitesse de propagation associée en fonction de l'étirement sur une gamme de rayons allant de 0 à 35 mm. Ces résultats expérimentaux ont été mesurés dans une cellule close à volume constant d'un rayon interne de $R_{cell} = 82.55 \text{ mm}$.

Cette figure illustre parfaitement l'influence des paramètres extérieurs sur la vitesse de propagation absolue du front de flamme. Les zones fortement non-linéaires influencées par l'allumage et le confinement se distinguent de la zone exploitable où la flamme se propage de façon laminaire quasi-stationnaire. L'impact résultant sur l'extrapolation à étirement nul si l'intervalle de point de mesure n'est pas bien sélectionné est ici fortement souligné.

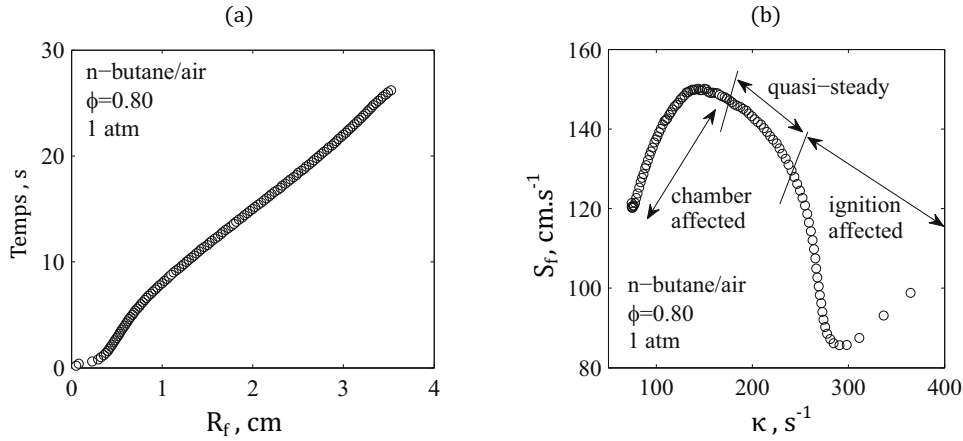


FIGURE 3.21 – Evolution temporelle du rayon de flamme (a) et de la vitesse absolue en fonction de l'étirement (b) pour une flamme $n - C_4H_{10}/air$ aux conditions NTP, extrait de [87].

3.7 Conclusion sur les flammes en expansion sphériques libres

Au final, la mesure de la vitesse de combustion laminaire sur des flammes réelles reste expérimentalement un challenge. Parmi tous les dispositifs expérimentaux existants, l'étude des flammes sphériques en expansion libre dans une enceinte close a été sélectionnée car elle permet des conditions thermodynamiques de pression et de température maîtrisées et proches des systèmes de combustion industriels ou des moteurs à combustion interne. De plus, l'étirement est défini sans ambiguïté par la topologie du front de flamme. La présentation des différents phénomènes déstabilisant le front de flamme aura permis de définir des critères pour sélectionner un intervalle de mesure exploitable où seul l'étirement est le facteur influent sur la flamme et sa propagation. Néanmoins, et contrairement à la géométrie idéale, la définition de S_l^0 en configuration SEF n'est pas triviale et les vitesses présentées dans le chapitre 2 ont été redéfinies pour cette configuration. Au final quatre définitions permettant la mesure de la vitesse de combustion laminaire étirée ont été présentées :

- La vitesse de déplacement définie sur l'isotherme d'entrée dans le front de flamme. Elle permet de définir une expression pour déterminer la vitesse de combustion laminaire qui ne nécessite pas l'estimation de paramètres thermodynamiques par :

$$S_l^0 = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \tilde{S}_{d,u} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} (S_f - u_g). \quad (3.45)$$

Cette expression ne fait intervenir aucune hypothèse, mais nécessite des techniques com-

plexes pour mesurer la vitesse d'entrée des gaz frais dans le front de flamme u_g .

- La vitesse de déplacement définie sur l'isotherme séparant les gaz brûlés du front de flamme :

$$S_l^0 = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\rho_b}{\rho_u} \tilde{S}_{d,b} \approx \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u(t=0)} S_f. \quad (3.46)$$

Dans la dernière forme, exploitable expérimentalement, de nombreuses hypothèses sont introduites :

- les gaz brûlés sont au repos, i.e. $u_b = 0$,
- les gaz brûlés sont à l'état d'équilibre chimique adiabatique et leur densité est spatialement homogène et constante,
- la densité des gaz frais n'évolue pas avec la propagation de la flamme, i.e. que les phénomènes de compression intervenant dans les enceintes fermées ne sont pas pris en compte.

Or ces hypothèses influencent la mesure de S_l^0 en fonction du mélange et des conditions thermodynamique étudiées. N.B : cette expression peut aussi se développer comme la vitesse de consommation exprimée à partir d'un produit de combustion ou d'un bilan de masse d'une flamme infiniment mince pour les mêmes hypothèses.

- La vitesse de consommation d'un réactif (Eq. 3.26) :

$$S_l^0 = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \langle S_{c,r} \rangle = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left(\frac{dR_r}{dt} - \frac{R_0^3 - R_r^3}{3R_r^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \right).$$

Cette expression ne fait intervenir qu'une hypothèse : le rayon équivalent R_r doit être représentatif de l'évolution du front de flamme et doit être utilisable dans l'expression théorique de la vitesse de consommation exprimée en coordonnées sphérique, Eq. 3.18. Néanmoins, la mesure de ρ_u n'est pas triviale et reste un problème.

- La vitesse de consommation d'un réactif développée avec l'hypothèse d'une compression isentropique des gaz frais (Eq. 3.28) :

$$S_l^0 = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \langle S_{c,r} \rangle = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \left(\frac{dR_r}{dt} - \frac{R_0^3 - R_r^3}{3R_r^2} \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt} \right).$$

Cette expression permet de remplacer l'estimation de ρ_u par l'estimation de la pression dans la cellule de mesure. Cependant, elle nécessite une très grande précision des capteurs de pression pour obtenir des résultats valides.

Ces quatre vitesses sont différentes pour des flammes étirées et seules leurs valeurs à étirement nul doit être identique. Par ailleurs, les modèles d'extrapolation à étirement nul sont multiples

mais il doivent rester pertinent pour chaque vitesse mesurée. Ils peuvent être de type linéaire comme :

$$S = S_l^0 - \ell\kappa, \quad (3.47)$$

ou de type non linéaire, comme :

$$\left(\frac{S}{S_l^0}\right)^2 \ln\left(\frac{S}{S_l^0}\right) = -2\frac{\ell\kappa}{S_l^0}. \quad (3.48)$$

Il a été montré que leur utilisation n'est pas triviale et qu'un modèle doit être sélectionné au cas par cas en fonction de la richesse et de l'intervalle de mesure pour chaque condition d'étude. Ces modèles définissent un paramètre, la longueur (ou nombre) de Markstein ℓ_i qui caractérise la sensibilité à l'étirement d'une vitesse caractéristique d'un mélange combustible. En effet, cette longueur est propre à chacune des vitesses définies en SEF car elle est très dépendante de l'isotherme où elle est mesurée et change de signe en fonction de la position de l'isotherme dans le front de flamme. Enfin, il a aussi été montré que sa valeur est intimement liée aux instabilités thermo-diffusives, pilotées par le nombre de Lewis du mélange.

Deuxième partie

Dispositifs numériques et expérimentaux de l'étude

Chapitre 4

Outils dédiés à la simulation numérique directe des phénomènes instationnaires de combustion

Ce chapitre présente les outils numériques utilisés au cours de ces travaux de thèse. Trois différents codes dédiés à la simulation de mélanges réactifs ont été utilisés dans le cadre de plusieurs collaborations internationales. Les différents calculs ont été réalisés par les équipes de recherche ayant développé ces codes pour nous permettre d'effectuer le traitement et l'analyse. Ce chapitre présente en premier lieu les notions nécessaires à la simulation numérique d'écoulements réactifs. Puis, deux codes permettant des simulations DNS 1D sphériques seront exposés. Ils ont été utilisés au cours de collaborations internationales avec des équipes extérieures, dans le but d'analyser nos résultats expérimentaux. Il s'agit premièrement du code *TORC* développé par l'équipe du Prof. F.N. Egolfopoulos de l'Université de Californie du Sud, département d'ingénierie mécanique et aérospatiale. Le second est le code *A-SURF* développé par l'équipe du Dr. Z. Cheng de l'université de Pékin, département des sciences mécaniques et de l'ingénieur, SKLTCS. Enfin, un troisième code est présenté. Il s'agit du code *YALES 2* développé au sein du laboratoire CORIA. Il a été utilisé au cours de ces travaux de thèse dans l'objectif de réaliser des simulation DNS/LES 3D reproduisant au plus près le dispositif expérimental du CORIA, présenté par la suite dans le chapitre 6. Ce code sera présenté en détail avec les différentes routines utilisées pour reproduire les expérimentations. L'ensemble des simulations effectuées avec ce code ont été réalisées en collaboration avec M^r. V. Moureau et M^r. H. Larabi de l'équipe

de modélisation numérique de la combustion du laboratoire CORIA. Pour conclure, un tableau comparatif synthétisant les propriétés et fonctionnalités de ces différents codes sera présenté.

Sommaire

4.1	La simulation de la combustion	71
4.1.1	Les équations de l'aérothermochimie	71
4.1.2	La résolution de la diffusion des espèces	72
4.1.3	La méthode numérique retenue : la DNS	72
4.1.4	La simulation du rayonnement thermique	75
4.1.5	Conclusion sur la simulation de la combustion	79
4.2	Les codes 1D sphériques	79
4.2.1	Le code <i>TORC</i>	79
4.2.2	Le code <i>A-SURF</i>	81
4.2.3	Conclusion sur les codes 1D	82
4.3	Le code 3D : <i>YALES2</i>	82
4.3.1	Présentation du code <i>YALES2</i>	82
4.3.2	Les outils numériques spécifiques utilisés dans <i>YALES2</i>	83
4.4	Conclusion sur les dispositifs dédiés à la simulation numérique	90

4.1 La simulation de la combustion

4.1.1 Les équations de l'aérothermochimie

Le système d'EDP à résoudre pour simuler un écoulement fluide réactif dans un milieu continu dans un repère cartésien à trois dimensions est le système d'équations de Navier-Stokes effectuant le bilan des variables conservatives ρ , ρu_i , ρe_t et ρY_k , auquel s'ajoute une équation pour inclure la conservation des espèces :

- l'équation de conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (4.1)$$

avec ρ la densité et u_i la vitesse de l'écoulement dans la direction i .

- l'équation de conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_1^N (Y_k f_{k,j}), \quad (4.2)$$

avec P la pression, Y_k la fraction massique de l'espèce k , $f_{k,j}$ la résultante des forces massiques s'exerçant sur elle dans la direction j et τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses.

- l'équation de conservation de l'énergie totale, ici exprimée à partir de la température :

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \dot{\omega}_T + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \left(\rho \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k V_{k,i} \right) \frac{\partial T}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{\mathcal{Q}} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} V_{k,i}, \quad (4.3)$$

avec C_p la capacité thermique massique à pression constante du mélange et $C_{p,k}$ celle de l'espèce k , $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur, λ la conductivité thermique du mélange et $\dot{\mathcal{Q}}$ le terme source d'énergie volumique apportée par l'extérieur ; par exemple une étincelle, un arc laser ou un rayonnement thermique.

- l'équation de conservation des espèces :

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k, \quad (4.4)$$

avec $V_{k,i}$ la vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i et $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k .

- et l'équation d'état :

$$P = \frac{\rho RT}{\mathcal{M}}, \quad (4.5)$$

avec R la constante des gaz parfait et \mathcal{M} la masse molaire moyenne du mélange.

Notons que ce système décrivant la propagation d'une flamme de prémélange peut être simplifié comme présenté au chapitre 2 en considérant la configuration de flamme 1D plane.

4.1.2 La résolution de la diffusion des espèces

La diffusion est majoritairement pilotée par les gradients de concentration et est représentée par la loi de Fick. Mais lorsqu'un mélange est soumis à un fort gradient de température, le phénomène de thermophorèse, ou effet Soret, décrivant le couplage entre les gradients de température et les flux massiques n'est pas forcément négligeable [17, 114]. Notamment, le mouvement des espèces légères (ou lourdes) est favorisé (défavorisé) vers les zone chaudes.

La diffusion des espèces est représentée dans le système d'équations de Navier-Stokes par une vitesse. Cette vitesse s'exprime dans l'hypothèse d'un mélange moyen comme la somme de trois termes [115] :

$$V_k = V_{k,Y} + V_{k,T} + V_k^c, \quad (4.6)$$

avec :

- $V_{k,Y}$ la vitesse de diffusion de Fick définie telle que :

$$Y_k V_{(k,Y),j} = -D_{km} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j}, \quad (4.7)$$

dans la direction x_j

- $V_{k,T}$ la vitesse de diffusion de Soret définie telle que :

$$Y_k V_{k,T} = -D_{km} \Theta_k \mathcal{M}_k \nabla T / (T \overline{\mathcal{M}}), \quad (4.8)$$

avec Θ_k le rapport de la diffusion thermique de l'espèce k .

- et la vitesse correctrice V_k^c , introduite ici pour assurer la compatibilité entre l'équation de conservation de la masse 4.1 et des espèces 4.4

Ainsi, pour la simulation de la combustion de carburant lourd (CH_4 et plus), seule la vitesse de diffusion de Fick sera résolue pour réduire le temps de calcul. La vitesse de diffusion de Soret ne sera calculée que pour les mélanges H_2/air .

4.1.3 La méthode numérique retenue : la DNS

Il existe trois approches pour résoudre le système d'équations de Navier-Stokes précédemment présenté à la section 4.1.1 en simulation numérique : la méthode RANS, la simulation des grandes échelles LES et la simulation numérique directe DNS.

Ces trois approches se différencient principalement par leur technique de simulation de l'écoulement fluide :

1. totalement modélisé en RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) à l'aide d'un opérateur de moyenne temporelle pouvant prendre la forme d'une moyenne de Reynolds ou de Favre [11]
2. partiellement modélisé en LES (Large Eddy Simulation) où les grandes structures de l'écoulement appelées structures résolues sont simulées et les plus petites statistiquement isotropes modélisées.
3. entièrement résolu en DNS (Direct Numerical Simulation) où toutes les échelles de l'écoulement sont résolues dans la limite de la taille des mailles composant le domaine de calcul.

Or, l'étude de la flamme en propagation sphérique libre s'effectue dans un écoulement fluide laminaire et c'est la réaction de combustion qui est la cible des calculs. De plus, cette réaction chimique a lieu à une échelle infime comparée aux échelles caractéristiques de l'écoulement fluide. La taille des mailles peut alors être fonction de la résolution de la chimie. Pour les écoulements turbulents, plusieurs méthodes existent pour résoudre les équations liées à la chimie pour ces différentes approches numériques, comme la chimie tabulée ou la modélisation [11, 116, 117]. Mais pour résoudre la chimie d'un écoulement laminaire sans introduire de modèle, i.e. avec les équations présentées à la section 2.3, seule la méthode numérique DNS peut être employée. Ainsi, la taille des mailles doit être adaptée pour résoudre la chimie avec précision. La résolution de ces équations dans l'épaisseur du front de flamme impose un nombre de cellules minimales pour le calculer, correspondant avec la résolution spatiale du système. Dans le cas simplifié d'une réaction irréversible à une étape, la structure interne de la flamme doit être représentée par au moins 10 à 20 mailles d'après *Poinsot & Veynante* [11]. Soit pour un hydrocarbure simple aux conditions normales de température et de pression dont l'épaisseur de flamme est de l'ordre de 0.5 mm, des mailles ayant au niveau du front de flamme une dimension δx de l'ordre de 25 à 50 μm au maximum. La figure 4.1 illustre cette influence de la discrétisation spatiale sur le profil du taux de réaction avec une résolution de 10 μm de l'espèce radical OH d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression simulée avec YALES2. Dès lors, cette méthode nécessite des moyens importants en terme de mémoire et de puissance CPU. Elle se limite donc souvent à des cas d'étude et/ou aux petites géométries.

De plus, la taille du maillage n'est pas la seule contrainte et les mécanismes réactionnels employés pour simuler la combustion peuvent aussi être une source de complexité du calcul

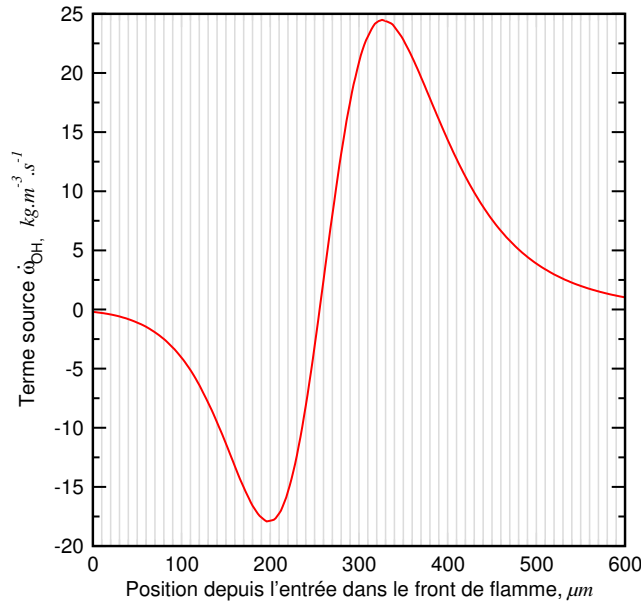


FIGURE 4.1 – Evolution du terme source du radical OH dans l'épaisseur du front sur un maillage à $10 \mu m$, d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression simulée avec YALES2.

numérique. En effet, plus l'hydrocarbure est grand, i.e. que sa chaîne carbonée est longue, plus le nombre de réaction N_r et d'espèces intermédiaire mise en jeu N_{esp} est important. C'est pourquoi, les schémas cinétiques sont généralement réduits au maximum pour diminuer le temps de calcul. Mais alors leur validation est effectuée pour un couple carburant/conditions thermodynamiques. Ainsi, pour un même combustible, plusieurs mécanismes peuvent être utilisés en fonction des conditions étudiées.

Enfin, la taille du maillage peut aussi imposer la valeur du pas de temps selon le schéma numérique employé. On distingue deux types de schémas de discrétisation :

- Les schémas numériques de type implicite qui sont intrinsèquement stables.
- Les schémas explicites dont la stabilité est fonction de la condition de CFL, Courant-Friedrichs-Lewy, définie par :

$$2v\Delta t \leq (\Delta x)^2, \quad (4.9)$$

avec v la vitesse dans la direction x .

Ainsi, assurer la stabilité d'un calcul dont on souhaite diminuer la taille des mailles implique une augmentation du temps de calcul à chaque itération, à cause de l'utilisation d'un schéma de

discrétisation complexe ou de la condition de CFL.

4.1.4 La simulation du rayonnement thermique

Le rayonnement thermique est un mode de transfert d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique. Ces transferts doivent être caractérisés lorsque de forts gradients de température sont observés dans un milieu capable d'émettre ou d'absorber ces ondes. C'est le cas pour les phénomènes de combustion où la flamme sépare les gaz brûlés chaud des gaz frais qui n'ont pas encore réagi. L'objectif de cette section est de présenter les différentes méthodes pour représenter le rayonnement thermique en simulation numérique.

4.1.4.1 De la luminance à l'équation de transferts radiatifs (ETR)

De par la topologie de la flamme sphérique en expansion dans une enceinte fermée, contenant des gaz brûlés au coeur, les phénomènes de rayonnement thermique sont inhérents. Ils s'opèrent à la fois entre les gaz brûlés (chaud) et les gaz frais ; mais aussi entre les gaz et la paroi de la cellule de mesure. Pour les prendre en compte dans les simulations numériques, il faut ajouter au système de Navier-Stokes l'équation de transfert radiatif. La luminance est définie comme la densité de flux d'énergie radiative monochromatique dF_ν rayonnée à travers une élément de surface dS , à la position \vec{r} et orientée selon la direction normale \vec{n} , dans un angle solide élémentaire $d\Omega$ centré sur la direction \vec{u} pendant un temps dt autour de l'instant t , par l'équation :

$$L_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{dF_\nu}{(\vec{u} \cdot \vec{n}) d\Omega dS dt}. \quad (4.10)$$

La figure 4.2 illustre toutes ces grandeurs sur un schéma.

Trois phénomènes décrivent les interactions entre un milieu fluide et un rayonnement radiatif qui le traverse : l'émission, l'absorption et la diffusion. Une description complète de ces trois phénomènes est faite dans [118]. L'émission et l'absorption sont définies, pour une luminance incidente $L_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega})$ à travers une épaisseur dr , par les équations :

— pour l'émission de :

$$dL_{\nu,emi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = k_{\nu,emi} L_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}) dr, \quad (4.11)$$

— et pour l'absorption de :

$$dL_{\nu,abs}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = -k_{\nu,abs} L_\nu(\vec{r}, \vec{\Omega}) dr. \quad (4.12)$$

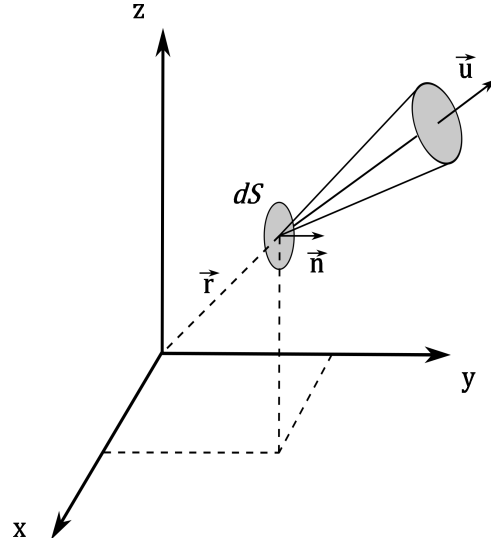


FIGURE 4.2 – Schéma illustrant la définition de la Luminance.

Généralement, l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local (ETL) est introduite pour définir les coefficients $k_{\nu,emi}$ et $k_{\nu,abs}$ telle que :

$$k_{\nu,emi} = k_{\nu,abs} = k_{\nu}, \quad (4.13)$$

avec k_{ν} le coefficient d'absorption monochromatique, exprimé en m^{-1} . Cette équation signifie qu'il n'y a pas de redistribution fréquentielle entre l'absorption et l'émission, i.e. que le milieu capable d'absorber émettra dans les mêmes proportions aux mêmes longueurs d'onde.

Le troisième phénomène qu'est la diffusion traduit quant à lui l'interaction entre le rayonnement et la matière. Un photon, qui compose le rayonnement, peut être absorbé par un atome et provoquer un changement d'orbite d'un électron. Cet électron va alors émettre un rayonnement de même longueur d'onde dans une direction aléatoire pour retomber à son état fondamental. Le phénomène de diffusion est divisé en deux types :

- la diffusion entrante, i.e. le cas d'un gain de luminance. En intégrant les contributions de toutes les luminances provenant des directions $\vec{\Omega}'$ à la longueur d'onde ν' déviées dans l'angle solide de direction $\vec{\Omega}$ à la longueur d'onde ν , elle est définie par :

$$dL_{\nu,diff\ in}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sigma_{\nu,diff} \left(\frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} P(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) L_{\nu'}(\vec{\Omega}') d\Omega' \right) dr, \quad (4.14)$$

avec $\frac{1}{4\pi} \int_0^{4\pi} P(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) d\Omega'$ la fonction densité de probabilité.

- et la diffusion sortante, i.e. le cas d'une perte de luminance, définie par :

$$dL_{\nu,diff\ out}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = -\sigma_{\nu,diff} L_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega}) dr. \quad (4.15)$$

On note par la suite la somme des deux contributions, entrante et sortante, du phénomène de diffusion : $dL_{\nu,diff}$.

La somme de tous les termes précédents définit la variation totale de luminance comme :

$$dL_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = dL_{\nu,abs}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + dL_{\nu,emi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + dL_{\nu,diff}(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (4.16)$$

En introduisant le coefficient d'extinction total β_{ω} :

$$\beta_{\nu} = k_{\nu} + \sigma_{\nu} \quad (4.17)$$

et l'albédo de diffusion ω_{ν} :

$$\omega_{\nu} = \frac{\sigma_{\nu}}{k_{\nu} + \sigma_{\nu}}, \quad (4.18)$$

l'ETR, sous sa forme différentielle, s'exprime alors par :

$$\frac{dL_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega})}{dr} = \beta_{\nu} \left(S_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega}) - L_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \right), \quad (4.19)$$

avec :

$$S_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = (1 - \omega_{\nu})L_{\nu}^0(\vec{r}) + \frac{\omega_{\nu}}{4\pi} \int_{4\pi} P(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) L_{\nu'}(\vec{\Omega}') d\Omega'. \quad (4.20)$$

Au final, le terme source $\dot{\mathcal{Q}}$ exprimé dans l'équation 4.3 se calcule alors par l'équation :

$$\dot{\mathcal{Q}} = \nabla \cdot q_r = \int_0^{\infty} S_{\nu}(\vec{r}) d\nu, \quad (4.21)$$

avec $q_r(\vec{r})$ le flux radiatif à la position position \vec{r} , défini comme une quantité non directionnelle car intégrée dans tout l'espace (4π) par :

$$q_r(\vec{r}) = \int_{4\pi} L_{\nu}(\vec{r}, \vec{\Omega}) u d\Omega. \quad (4.22)$$

4.1.4.2 Les modèles de détermination du flux radiatif

Trois différentes méthodes pour considérer le flux radiatif ont été employées dans les différentes simulations effectuées au cours de ce travail de thèse. Ce sont les modèles :

1. adiabatique (ADB) : les échanges thermiques radiatifs ne sont pas pris en compte et le terme source volumique extérieur est nul :

$$\dot{\mathcal{Q}} = 0. \quad (4.23)$$

Ce modèle est donc un cas limite où tous les effets du rayonnement thermique sont négligés.

2. optiquement mince (OTM : Optically Thin Model) : seul le rayonnement thermique émis par des espèces définies comme ayant un fort pouvoir radiatif (comme H_2O , CO_2 ou encore CH_4) est calculé. Le flux thermique s'exprime comme :

$$q_r = -4\pi\sigma K_p (T^4 - T_\infty^4). \quad (4.24)$$

Dans cette équation, σ est la constante de Stefan-Boltzmann, T et T_∞ sont respectivement la température locale et la température dans les gaz frais et K_p le coefficient principal d'absorption de Planck. Ce dernier est défini par : $K_p = \sum_j P_j K_j$ avec P_j et K_j la pression partielle et le coefficient d'absorption de Planck de l'espèce radiative j .

Ce modèle est un cas limite où les effets du rayonnement thermique sont exagérés car le phénomène d'absorption n'est pas pris en compte.

3. FS-SNB-cK (Full Spectrum - Statistical Narrow Band - correlated K) [119, 120, 121] : tous les phénomènes de transferts radiatifs sont résolus par bande spectrale étroites $\Delta\nu$. Cette méthode de calcul repose sur la combinaison des modèles : FSK [122], SNB [79, 123] et k-Correlated [124]. Une bande étroite est définie pour un intervalle du spectre sur lequel la luminance de Planck peut être considérée linéaire, de sorte que l'intégrale de la fonction de Planck sur la bande étroite puisse être calculée comme le produit de la valeur de la fonction de Planck au milieu de la bande et de la largeur de la bande. Ainsi, le principe de cette technique est d'utiliser les coefficients d'absorption tabulés pour des conditions spécifiques avec la méthode SNB et d'exprimer de manière simple les coefficients k_ν . Ils sont déterminés à partir de deux variables. La fonction de distribution $f_{\Delta\nu}(k)$ et la fonction de distribution cumulative $g_{\Delta\nu}(k)$, calculées par transformée de Laplace de la transmissivité du gaz. Toutes les équations et leurs développements sont présentés dans [80]. Au final, toutes les bandes sont regroupées et pondérées par la fonction de Planck pour tenir compte de la variation d'intensité du rayonnement sur tout le spectre. Ainsi, ce modèle de type global n'est pas un cas limite et permet de simuler de près la flamme réelle. Néanmoins il nécessite un coût de calcul en temps et puissance CPU plus important que les modèles ADB et OTM.

D'autres modèles existent pour simuler une flamme réelle, comme le modèle WSGG pour Weighted Sum of Grey Gas [125], EWB pour Exponential Wide Band [126], ou SLW pour Spectral Line WSGG basé sur des données LBL (ligne par ligne) [127]. Mais n'ayant pas été utilisés car plus coûteux ou moins précis que le modèle FS-SNB-cK, ils ne sont pas

présentés et il faut se référer aux citations pour plus d'informations.

4.1.5 Conclusion sur la simulation de la combustion

En conclusion, pour simuler un phénomène de combustion sans introduire de modèle, il faut être capable de résoudre le système d'équations de Navier-Stokes étendues aux écoulements réactifs multi-espèces des grandes structures, caractéristique de l'écoulement moyen, aux plus petites structures où a lieu la réaction chimique. Ainsi, parmi les méthodes numériques existantes pour simuler un écoulement fluide réactif, seule la méthode DNS permet d'inclure dans les calculs de l'écoulement un calcul exact de la réaction de combustion. Cette méthode numérique est la plus coûteuse en terme de puissance et temps de calcul CPU. Elle nécessite la mise en place d'un maillage raffiné jusqu'à des mailles de quelques dizaines de micromètres pour permettre une bonne résolution à l'échelle chimique. Et selon la technique de discrétisation temporelle employée, implicite ou explicite, la taille des mailles limite le pas de temps par la condition de CFL pour assurer la stabilité des calculs. De plus, de part la topologie de la flamme sphérique, les effets du rayonnement thermique doivent être pris en compte. Cela peut se faire à partir des deux modèles limites de résolution du flux thermique radiatif : ADB et OTM. Ils définissent un intervalle où la flamme réelle se place. Ou bien, il faut simuler tous les phénomènes liés au transfert de chaleur radiatif, comme avec le modèle FS-SNB-cK. Le coût de calcul devient alors bien plus important mais les résultats de la simulation pourront être directement comparés aux mesures expérimentales.

4.2 Les codes 1D sphériques

Les résultats des codes 1D sont issus de collaborations avec des équipes extérieures aux laboratoires CORIA et PRISME. Cette section présente brièvement leur fonctionnement et leur capacité de calcul. La validation de schémas cinétiques, maillage, etc ... utilisés dans ces études ne sera pas présentée mais référencée à différents articles de la littérature.

4.2.1 Le code *TORC*

Le code *TORC* (Transient One-dimensional Reacting flow Code) permet des simulations DNS de flammes SEF en résolvant le système d'équations de N-S en coordonnées sphérique 1D. Il utilise un solveur d'équation différentielle ordinaire (ODE) avec l'approximation des différences

finies similaire à PREMIX [12], avec un schéma d'ordre 1 utilisé pour les termes convectifs et un schéma d'ordre 2 pour les termes diffusifs. Il intègre la librairie de sous-routines de transport développé au laboratoire Sandia [128]. Les équations de conservation discrétisées spatialement sont intégrées temporellement avec un solveur DASSL [129] de haute précision, implémenté avec un pas de temps et un ordre de contrôle adaptatifs.

Spécificité des calculs avec *TORC* :

Le domaine du calcul utilisé est équivalent à une sphère de rayon interne $R_0 = 250 \text{ mm}$. Le maillage de ce domaine est adaptatif et redéfini dynamiquement avec la propagation de la flamme. Il est divisé en cinq zones, chacune composée de mailles uniformes, telles que le front de flamme est maintenu par un algorithme de contrôle dans la zone la plus résolue. Lorsqu'un nouveau maillage est défini, les solutions du précédent sont déplacées par interpolation avec la méthode flying/warm restart [130, 131]. L'allumage de la combustion est effectué avec un noyau de gaz brûlés de rayon $R_{allumage} = 1.8 \text{ mm}$. Les conditions aux limites du calcul sont :

— en $r = 0$:

$$\left(\frac{dT}{dR}\right)_{r=0} = 0, \quad u_{r=0} = 0, \quad \left(\frac{dY_k}{dR}\right)_{r=0} = 0 \quad (4.25)$$

— en $r = R_0$:

$$\left(\frac{dT}{dR}\right)_{r=R_0} = 0, \quad \left(\frac{dY_k}{dR}\right)_{r=R_0} = 0 \quad (4.26)$$

Deux carburants ont fait l'objet d'études avec ce code : l'éthylène et le n-heptane. Les pré-mélanges combustibles formés avec ces deux carburants ont été réalisés avec de l'air composé à 21% d' O_2 . Le schéma cinétique utilisé pour l'éthylène est le schéma *USC Mech II* [132], comportant 111 espèces et 784 réactions réversibles. Pour le $n - C_7H_{16}$, c'est le schéma *JetSurf 1.0* [133], réduit à 100 espèces et 803 réactions réversibles avec la méthode DRG [134], qui est utilisé.

Le but des simulations effectuées avec ce code a été l'étude de la fiabilité des modèles d'extrapolation et l'amélioration des techniques de comparaison exp/num. La sélection d'un domaine de simulation d'une longueur de 250 mm permet dès lors de simuler des flammes laminaires dont l'éirement est très faible (i.e. pour de grands rayons de flamme). La comparaison des valeurs simulées et extrapolées sur un intervalle de données équivalent aux mesures expérimentales

permettra de quantifier l'influence des modèles d'extrapolation à étirement nul. De plus, afin de prendre en compte des effets potentiels du rayonnement thermique, les simulations ont été effectuées avec deux types de modèles de rayonnement : le modèle adiabatique (ADB) et le modèle optiquement mince (OTM). Les résultats de cette étude sont présentés dans le chapitre 9.

4.2.2 Le code *A-SURF*

Le code *A-SURF* (Adaptative Simulation of Unsteady Reactiong Flow), permet lui aussi de réaliser des simulations DNS 1D sphériques. La validation de ce code pour cette configuration de flamme est présentée dans [135]. Il utilise la méthode des volumes finis pour discrétiser le système d'équations de Navier-Stokes étendues. La méthode de scission de *Strang* [136] est employée pour traiter séparément l'évolution temporelle du terme réactionnel très raide et les termes de convection et diffusion, avec une procédure par étape fractale [137]. Pour effectuer l'intégration temporelle, calculer le flux convectif et le flux diffusif, les schémas d'ordre deux : TVD Runge-Kutta [138], différence centrée et MUSCL-Hancock [139] sont respectivement utilisés. La chimie est résolue en utilisant le solveur VODE [140]. Elle peut être traitée par le modèle simple d'une réaction à une étape ou par un modèle détaillé. Pour ce dernier, les propriétés thermodynamiques et de transports sont évaluées par les packages CHEMKIN et TRANSPORT [115, 141]. Enfin, les trois modèles de résolution de l'ETR : ADB, OTM et FS-SNB-cK, peuvent être utilisés.

Le domaine du calcul 1D est équivalent à une sphère, de rayon interne R_0 . Le maillage de ce domaine est non-structuré et adapté dynamiquement avec la propagation de la flamme. Il est raffiné par la méthode h-refined. Les cellules sont localement divisées dans la région d'intérêt où la chimie est résolue pendant que le maillage reste grossier dans le reste du domaine. Ainsi, la zone de réaction est définie sur un maillage fin avec une largeur de maille allant de $32 \mu\text{m}$ à $4 \mu\text{m}$. Le raffinement se base sur les dérivées première et seconde des distributions de température, vitesse et espèces majoritaires. Les détails de cet algorithme sont présentés dans [142, 143]. L'allumage est effectué par un noyau de gaz chaud de rayon et température adaptés aux conditions initiales pour reproduire numériquement l'allumage par arc électrique employé expérimentalement. Les conditions aux limites sont fixes et peuvent être transmissives, réfléchives ou non-réfléchives en fonction du calcul à effectuer [144].

Spécificité des calculs avec *A-SURF* :

Le code A-SURF a été utilisé au cours de ces travaux de thèse pour étudier l'influence des

phénomènes de diffusion sur les paramètres fondamentaux des flammes de prémélange SEF et plus particulièrement sur les effets de diffusion préférentielle, incorporant les phénomènes liés à la diffusion de Soret. La résolution de la diffusion de Soret est incluse dans le code uniquement pour les espèces légères [135] dans l’expression de la vitesse de diffusion présente dans l’équation de conservation des espèces 4.4. Cette méthode a été présentée à la section 4.1.2.

L’étude portant sur ces effets a été effectuée pour des mélanges H_2/air en fonction de la richesse à pression atmosphérique et en fonction de la pression (pour des conditions sub-atmosphérique) sur un mélange pauvre à une richesse fixée de $\phi = 0.5$. Le rayon interne du domaine a été fixé à $R_0 = 100 \text{ mm}$ pour simuler le dispositif expérimental du laboratoire PRISME (Chap. 5). Le schéma cinétique sélectionné est le schéma de Kéromnès (2013) [73]. Il a été éprouvé et validé sur des expérimentations du laboratoire PRISME dans [22]. Enfin, c’est le modèle ADB qui a été sélectionné pour représenter les phénomènes radiatifs car ce type de mélange, hors limite d’extinction, présente peu d’influence au rayonnement thermique. Les résultats de cette étude sont présentés dans le chapitre 9.

4.2.3 Conclusion sur les codes 1D

Au final, les deux codes 1D, *TORC* et *A-SURF*, ont été utilisés pour étudier l’un après l’autre des points précis sur les paramètres fondamentaux des flammes de prémélange SEF. Ces deux codes reconnus et validés dans de multiples études [41, 67, 145, 89], se veulent comparables aux expériences par la résolution des équations de N-S en coordonnées sphériques et l’adaptation de leur domaine de calcul aux dispositifs expérimentaux. Cependant, la limitation à une dimension ne permet que des études pour des configurations parfaitement symétriques. De plus, les équations et méthodes de résolution de ces codes ne sont pas nécessairement parfaitement conservatives. L’étude de configurations plus complexes oblige à effectuer des simulations 3D beaucoup plus coûteuses. Néanmoins, ces dernières sont nécessaires pour étudier les cas non symétriques ou les effets tri-dimensionnels sur les flammes.

4.3 Le code 3D : *YALES2*

4.3.1 Présentation du code *YALES2*

YALES2 est un code destiné à la simulation DNS ou LES d’écoulements réactifs incompressibles à faible nombre de Mach ($M \ll 1$) dans des géométries complexes 1D, 2D ou 3D [146].

La condition de faible nombre de Mach signifie que la pression est homogène en espace et que les fluctuations de pression ont un effet négligeable sur les propriétés thermodynamiques. La condition d'incompressibilité est définie par : $\frac{\partial \rho}{\partial P} \ll 1$. Elle est vérifiée dans le cas où $u \ll c$, soit $M \ll 1$. Ce code est spécialement optimisé pour résoudre le système d'équations instationnaires de Navier-Stokes en configuration de machines massivement parallèles. La méthode de discrétisation est basée sur l'approximation des volumes finis, i.e. que des équations bilan sont exprimées sur chaque face des mailles, assimilables à des volumes de contrôle. Les termes de divergence sont transformés en flux surfaciques et les calculs sont effectués directement sur ces flux. Cette méthode est bien adaptée aux lois de conservation et permet l'utilisation de maillage non-structurés, nécessaire aux géométries complexes.

Les équations de quantité de mouvement et d'espèces ou de scalaires sont résolues temporairement à l'aide d'un schéma hybride composé d'une méthode Runge-Kutta du 4^e ordre et de la méthode TFV4A [147]. Elles sont résolues spatialement par un schéma centré d'ordre 4. L'équation de Poisson est résolue par la méthode PCG (Preconditionned Conjugate Gradient) [148], avec un maillage grossier préconditionné par la déflation des gradients conjugués [149]. Ce type d'algorithme est optimisé pour les grandes échelles de l'écoulement [150].

4.3.2 Les outils numériques spécifiques utilisés dans *YALES2*

4.3.2.1 Allumage et chimie complexe

Pour initier la combustion, un noyau de gaz brûlés, dont la composition et la température sont déterminées à partir d'un solveur d'équilibre adiabatique chimique, est initialement placé au bord du domaine, correspondant au centre de la sphère, jusqu'à un rayon R_{ignit} . La diffusion de la température va alors amener les gaz frais adjacents dans les conditions d'inflammation. Le front de flamme va alors se créer et se propager de manière libre. L'énergie déposée, E_d , pour l'allumage par ce noyau de gaz brûlés peut être estimée par l'équation :

$$E_d = \frac{4}{3}\pi\rho_b C_{p,b} (T_b^0 - T_u) (R_{ignit})^3, \quad (4.27)$$

avec $C_{p,b}$ la capacité thermique à pression constante des gaz brûlés. Pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions initiales atmosphériques, le rayon R_{ignit} est fixé à 3 mm et correspond à un dépôt d'énergie de l'ordre de 50 mJ. Lorsque les conditions le nécessitent, ce rayon R_{ignit} est ajusté pour être suffisamment élevé et permettre une diffusion de la chaleur jusqu'à allumage tout en restant suffisamment faible pour ne pas avoir d'effets mémoires sur

la propagation du front de flamme. Pour l'intégralité des simulations présentées par la suite, ce rayon n'a jamais dépassé 3.5 mm. Comparée à d'autres stratégies d'allumage qui impose un profil de température initial, cette méthode permet de ne pas préchauffer les gaz frais trop loin dans le domaine de calcul avant l'allumage.

La combustion est modélisée par une chimie à taux fini, i.e. que le terme source chimique est résolu par une loi de type Arrhénius, dans l'objectif de fournir une description réaliste des propriétés thermodynamiques et de transport. Pour un écoulement laminaire, l'échelle de temps de la chimie est inférieure à celle de la convection ou de la diffusion. Pour éviter une limitation drastique du pas de temps à cause de la chimie, une approche d'opérateur séparé est appliquée [151]. L'intégration du terme source chimique est réalisée séparément en supposant une pression et une enthalpie totale constantes avec un solveur d'équation différentielle ordonnée (ODE) raide de la librairie *CVODE* [152]. Dans cette librairie, une formule de différentiation arriérée (BDF) du 5^e ordre est utilisée si l'intégration raide est réussie. Quand le système est trop dur à intégrer, c'est un schéma BDF A-Stable du 2nd ordre qui est employé. De plus, toujours dans l'objectif de minimiser le temps de calcul, un 'scheduler' dynamique est implémenté. Il a pour but de répartir de manière équitable la détermination des termes sources à chaque noeud du maillage entre processeurs et permet de diminuer le temps total nécessaire aux calculs en chimie complexe. Les vitesses de diffusion sont obtenues à partir de l'équation de conservation des espèces (Eq. 4.4) exprimée non pas par les équations définies à la section 4.1.2, mais avec l'approximation de *Hirschfelder & Curtiss* [11, 153] par :

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial\rho(u_i + V_i^c)Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\mathcal{M}_k}{\mathcal{M} \frac{\partial \mathcal{X}_k}{\partial x_i}} \right) + \dot{\omega}_k, \quad (4.28)$$

avec V_i^c une vitesse corrective pour assurer la conservation de masse globale, \mathcal{D}_k le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le fluide et \mathcal{X}_k la fraction molaire de l'espèce k .

Les mécanismes réactionnels sélectionnés sont :

- *GRI-mech 3.0* [19], comptant 53 espèces et 325 réactions réversibles, auquel a été ajouté l'espèce *He* (Helium) comme espèce inerte (i.e. n'intervenant pas chimiquement et ne pouvant être que partenaire de collision). Ce mécanisme permet de réaliser des simulations pour des hydrocarbures simples comme le méthane CH_4 .
- *H2O2-GL7* [154], comptant 6 espèces et 7 réactions réversibles, auquel a été ajouté l'espèce N_2 (Azote) comme espèce inerte. Il est quant à lui utilisé pour simuler des flammes H_2/air .

- enfin, le mécanisme réduit à 18 étapes de *Jerzembek* [155], pour simuler des flammes C_8H_{18}/air .

4.3.2.2 Maillage non structuré adapté

Pour étudier les flammes SEF, le domaine de calcul est une partie de sphère définie par un angle d'ouverture de 0.5° et une longueur $R_0 = 82.5 \text{ mm}$. Elle représente ainsi par symétrie une sphère de rayon interne R_0 , comparable au dispositif expérimental du laboratoire CORIA (cf Chap. 6). La figure 4.3 représente ce domaine, dont les côtés (verts sur le schéma) sont des surfaces périodiques pour assurer la reconstruction de la sphère. Une condition de mur adiabatique, ouvert ou fermé, est posée à la fin du domaine (bleu sur le schéma) pour permettre de simuler une flamme soumise aux effets de confinement ou non.

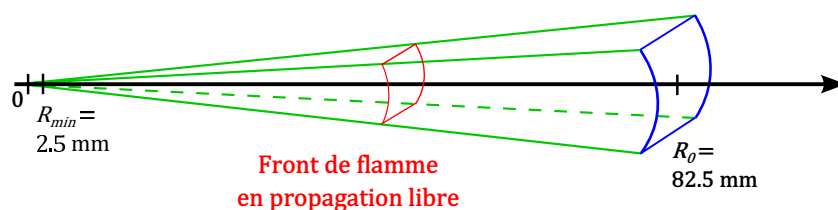


FIGURE 4.3 – Schéma du domaine de calcul 3D, équivalent à une sphère, exploité avec le code YALES2.

L'adaptation dynamique des maillages n'étant pas incluse dans le code, le maillage créé dans ce domaine est fixe. Il a été réalisé de manière non homogène afin de réduire le temps de calcul en gardant une bonne résolution à l'échelle de la chimie dans une zone d'intérêt où la flamme est étudiée. Expérimentalement, la flamme peut être observée jusqu'à un rayon de 2.3 cm par les accès optiques de la cellule de mesure présente au laboratoire CORIA. Le but des simulations étant de reproduire ce dispositif, le maillage a été construit tel que :

- de $R_{min} < r < 25 \text{ mm}$ la taille des mailles est homogène, telle que $L_{maille} \leq 10 \mu\text{m}$,
- et de $25 < r < 82.5 \text{ mm}$ la taille des mailles est croissante et atteint $200 \mu\text{m}$ à l'extrémité du domaine.

Pour sélectionner la taille de maille à définir dans la zone d'intérêt, plusieurs simulations ont été réalisées sur des flammes stoechiométriques CH_4/air aux conditions atmosphériques avec

1. Le rayon minimal ne peut pas être égal à zéro car au moins une maille doit être placée à l'origine du domaine pour éviter les singularités numériques. Il a été vérifié que pour $R_{min} < 2.5 \text{ mm}$, les résultats ne sont pas influencés.

le mécanisme réactionnel *GRI-mech 3.0* pour des tailles de mailles allant de $40 \mu m$ à $10 \mu m$. La richesse stoechiométrique a été choisie car c'est dans ces conditions que la chimie est la plus rapide, i.e. que l'épaisseur de flamme est la plus mince. Les figures 4.4 et 4.5 présentent, pour une flamme développée et définie par un rayon $R_f = 15 mm$, respectivement les profils de fraction massique des espèces majoritaires et des radicaux en fonction de la variable Y_c , définie par :

$$Y_c = Y_{H_2O} + Y_{CO_2} + Y_{CO}. \quad (4.29)$$

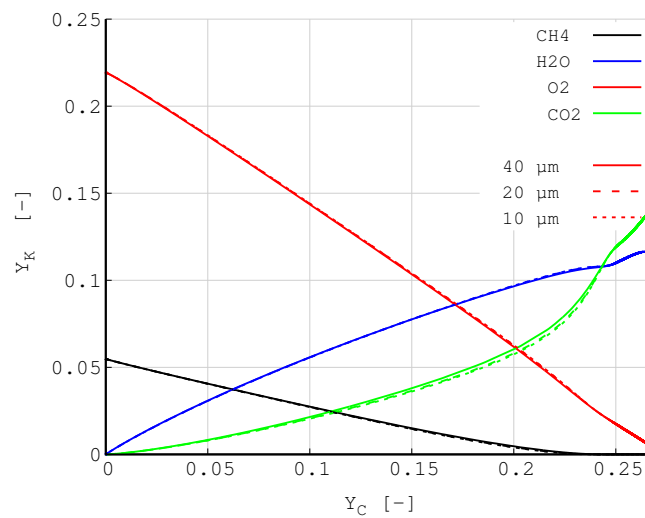


FIGURE 4.4 – Représentation des profils de fraction massique des espèces majoritaires en fonction de la variable Y_c en fonction de la taille de maille.

Ces figures démontrent que les espèces majoritaires sont bien résolues quelle que soit la taille des mailles dans la zone d'intérêt. En revanche, les profils de fraction massique des espèces radicalaires sont différents en fonction de la taille de maille. Seul les profils pour les tailles de maille de 10 et $20 \mu m$ convergent. Cette observation signifie que la chimie est bien résolue à partir d'un maillage à $20 \mu m$. Cela est confirmé sur la figure 4.6 qui représente les vitesses $\tilde{S}_{d,u}$ (Eq. 3.45) et $\tilde{S}_{d,b}$ (Eq. 3.46) en fonction de l'étirement κ pour les trois différentes résolutions du maillage.

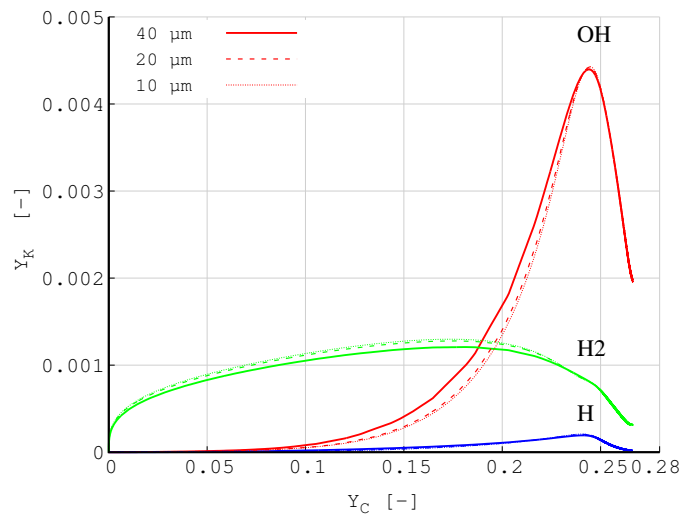


FIGURE 4.5 – Représentation des profils de fraction massique des espèces radicalaires en fonction de la variable Y_c en fonction de la taille de maille.

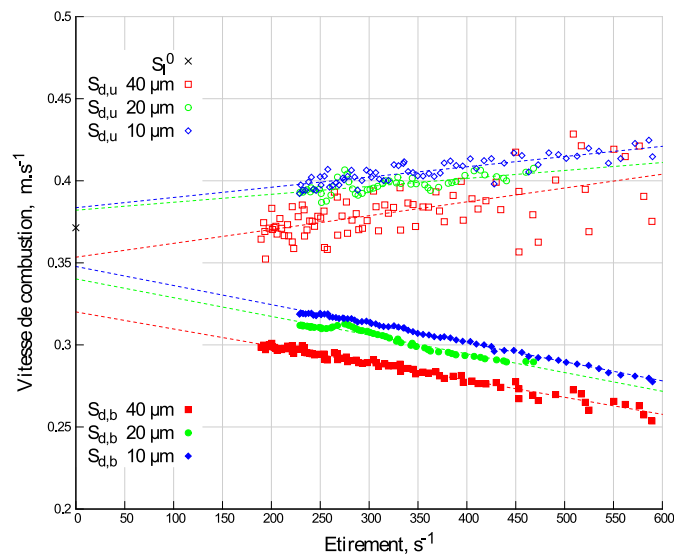


FIGURE 4.6 – Evolution des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et $\tilde{S}_{d,u}$ en fonction de l'étirement en fonction de la taille de maille.

Pour ces deux modèles de la vitesse de combustion laminaire, les valeurs calculées avec un maillage résolu à 10 ou 20 μm sont très proches alors que celles calculées avec un maillage résolu à 40 μm sont éloignées dans les deux cas. Ainsi, dans un soucis de réaliser des simulations les plus représentatives possibles de la réalité, des mailles d'une taille de 10 μm ont été sélectionnées pour construire le maillage de la zone d'intérêt. Le front de flamme des mélanges étudiés sera

alors résolu par un minimum de 40 mailles quelles que soient les conditions thermodynamiques ou la richesse, puisque l'épaisseur de flamme la plus mince des mélanges étudiés est de l'ordre de $\delta_f = 400 \mu m$.

4.3.2.3 Modèles de rayonnement thermique

Afin de prendre en compte les échanges thermiques radiatifs, les trois différentes méthodes de résolution de l'ETR présentées précédemment peuvent être utilisées dans YALES2 [146]. Ainsi, ce code permet des études aussi bien sur les cas limites du rayonnement thermique que sur un cas proche de la réalité.

Dans le cas particulier du modèle FS-SNB-cK, la méthode des ordonnées discrètes, initialement proposée par Chandrasekhar [156], est utilisée pour résoudre l'ETR sur un ensemble discrétisé de direction, couvrant au total tout l'espace (4π). Cette méthode, combinée avec une discrétisation en volume fini, est adaptée aux maillages non structurés et peut donc être utilisée pour des géométries complexes. Elle présente de plus un bon compromis entre précision et coût du calcul. Néanmoins, si la discrétisation angulaire n'est pas suffisante, des discontinuités dans la distribution de la luminance peuvent apparaître et conduire à des résultats non physiques. *Jensen et al.* [157] ont démontré que discrétiser tout l'espace (4π) avec une quadrature d'ordre 4 (24 directions) permet de conserver une bonne résolution de l'ETR. C'est cet ordre qui est utilisé pour les simulations effectuées avec le modèle FS-SNB-cK.

4.3.2.4 Modèle d'évaporation d'une goutte

Dans le but de pouvoir étudier l'évaporation d'une goutte d'huile à la traversée du front de flamme, des simulations 1D plan avec injection d'une goutte devant le front de flamme ont été réalisées. Cette étude importante a été réalisée pour l'évaluation et la validation des paramètres de la technique expérimentale de tomographie laser utilisée sur le dispositif expérimental du laboratoire CORIA (cf. Chap. 6). Son fonctionnement est le suivant : une goutte d'huile est injectée à 0.5 mm d'un front de flamme stationnaire aux mêmes température et vitesse que les gaz frais, comme représenté sur la figure 4.7.

La méthode de résolution par chimie détaillée, avec le même schéma cinétique que pour l'étude de la flamme SEF : *GRI-mech 3.0* [19], est utilisée pour réaliser ces simulations. La goutte d'huile est considérée comme une goutte Lagrangienne qui s'évapore, telle que le gaz et la goutte se déplacent à la même vitesse et sont couplés par les échanges de masse, de quantité

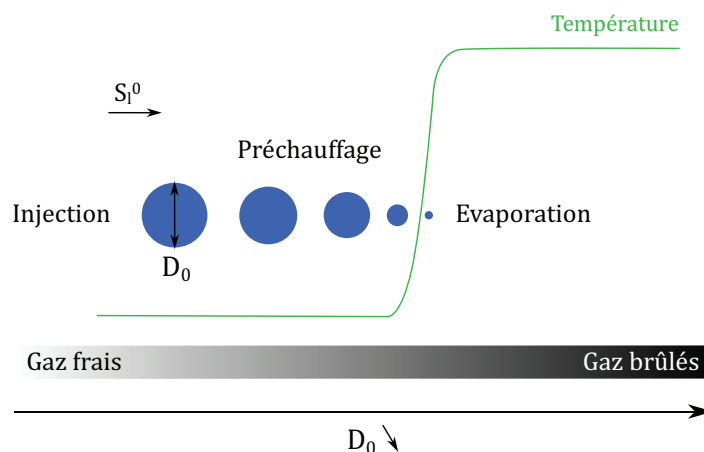


FIGURE 4.7 – Schéma du processus d'évaporation d'une goutte huile à travers un front de flamme.

de mouvement et d'énergie. Le modèle d'évaporation est basé sur les travaux de *Sirignano et al.* [158]. Il suppose une conductivité infinie, i.e. qu'aucun gradient ne s'observe dans la goutte et que la température de l'huile y est uniforme. L'évaporation est pilotée par la diffusion thermique et d'espèces de la surface de la goutte vers la phase gazeuse. L'interface liquide/gaz est supposée à l'équilibre thermodynamique. Au final, la relation de Clausius-Clapeyron sur la pression de vapeur à l'équilibre est utilisée pour calculer la fraction massique à la surface de la goutte. La fraction de fluide évaporé dans la phase gazeuse n'est pas homogène mais présente un gradient entre la surface de la goutte et le champ lointain. Il est représenté par la loi dite des " $\frac{1}{3}$ " qui définit les valeurs de référence T_{ref} et $Y_{f,ref}$ comme des valeurs pondérées respectivement au $\frac{2}{3} - \frac{1}{3}$ des valeurs à la surface et au champ lointain [159] :

$$\begin{aligned} T_{ref} &= \frac{2}{3}T_{surface} + \frac{1}{3}T_{\infty} \\ Y_{f,ref} &= \frac{2}{3}Y_{f,surface} + \frac{1}{3}Y_{f,\infty} \end{aligned} \quad (4.30)$$

La concentration de gaz évaporée autour de la goutte est ainsi plus élevée qu'au champ lointain et son impact sur l'évaporation de la goutte est pris en compte. Une description précise de cette technique est présentée dans [160].

L'étude complète du diamètre d'évaporation total des gouttes d'huiles par une flamme en fonction de leur diamètre initial est présentée au chapitre 6. Elle a permis de caractériser l'isotherme d'évaporation de l'ensemencement utilisé par ce dispositif expérimental et ainsi définir précisément le rayon de flamme mesuré expérimentalement pour réaliser des comparaisons directes expérience/simulation.

4.4 Conclusion sur les dispositifs dédiés à la simulation numérique

Pour conclure, ce chapitre a démontré que l'étude numérique des paramètres fondamentaux des flammes SEF doit s'effectuer à partir de simulations DNS avec une résolution chimie détaillée complexe. Il a montré que la prise en compte des phénomènes radiatifs, inhérents à la topologie de flamme, pouvait s'effectuer de différentes façons allant des deux modèles limites ADB et OTM où ils sont respectivement négligés ou exagérés, aux simulations les plus réalistes mais coûteuses en terme de calculs avec le modèle FS-SNVB-cK.

Les études numériques effectuées au cours de cette thèse ont été réalisées à partir de plusieurs collaborations. Elles ont permis l'accès à des codes DNS performants 1D et 3D, chacun utilisé pour l'étude d'un paramètre spécifique. Le tableau 4.1 synthétise le fonctionnement et les possibilités de calculs de ces différents codes numériques. Les résultats numériques sont présentés par la suite dans les chapitres 8 et 9.

-	<i>YALES2</i>	<i>A-SURF</i>	<i>TORC</i>
Approche numérique	DNS / LES	DNS	DNS
Intégration temporelle	RK4 et TFV4A	TVD RK2	DASSL
Intégration spatiale (convection & diffusion)	Schéma FV du 2 nd et 4 ^e ordre	Différence centrée d'ordre 2 et MUSCL-Hancock	Différence centrée d'ordre 1 et 2
Dimension du domaine	1D,2D,3D	2D,3D	1D
Type de maillage	Non structuré	Non structuré	Divisé en cinq zones de mailles identiques
Raffinement de maillage dynamique	Non	Oui, algorithme voir [142, 143]	Oui
Domaine utilisé	3D sphérique, $R_0 = 82.5mm$	1D sphérique, $R_0 = 100mm$	1D sphérique, $R_0 = 250mm$
Schéma radiatif	ADB, OTM et FS-SNB-cK	ADB, OTM et FS-SNB-cK	ADB et OTM
Résolution de la diffusion de Soret	Oui, couplage Soret/Dufour	Oui	Non
Parallélisation du code	Oui	Non	Non

TABLE 4.1 – Synthèse des caractéristiques des codes numériques exploités

Chapitre 5

Dispositif expérimental au laboratoire PRISME

Au cours de ces travaux de thèse, deux dispositifs expérimentaux, différents par leurs dimensions, leur méthode de préparation des mélanges combustibles et les diagnostics optiques mis en place ont été utilisés. Ce chapitre présente la cellule présente au laboratoire PRISME. Elle permet la mesure de la vitesse de propagation absolue d'un front de flamme, donnant accès à la définition de la LBV : $\tilde{S}_{d,b}$ (Eq. 3.46), et la mesure ponctuelle de profils temporels de température pour différents mélanges combustibles. La première partie est dédiée aux caractéristiques de ce banc d'essai et à la méthode de préparation des mélanges. Puis les deux différentes techniques optiques implémentées sont présentées dans la seconde partie.

Sommaire

5.1	L'enceinte de mesure	94
5.1.1	Présentation du dispositif	94
5.1.2	Mesure dynamique de la pression	95
5.1.3	Méthode de préparation du mélange combustible	96
5.2	Diagnostics optiques	98
5.2.1	Diagnostic optique 1 : la technique d'ombroscopie	98
5.2.2	Diagnostic optique 2 : la diffusion Rayleigh	103
5.3	Conclusion	115

5.1 L'enceinte de mesure

5.1.1 Présentation du dispositif

Le dispositif d'étude présent au laboratoire PRISME est centré autour d'une chambre de combustion haute pression et haute température parfaitement sphérique en acier inoxydable d'un volume de $4.2 L$, soit un diamètre interne $d = 200 mm$, représentée sur la figure 5.1. La température initiale du mélange peut être réglée de la température ambiante ($293 K$ réglée constamment dans la pièce) jusqu'à $473 K$ grâce à une résistance chauffante filaire fixée sur la paroi extérieure de la cellule. Cette température maximale est limitée par les joints d'étanchéité de la cellule en *Viton*[®]. Les résistances chauffantes et leurs implantations sont illustrées en orange sur la figure 5.1. La pression initiale supportée par le dispositif peut atteindre $10 bar$.

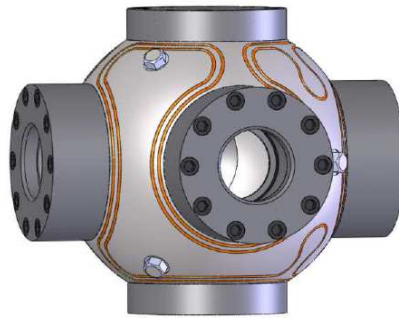


FIGURE 5.1 – Schéma de la cellule de mesure.

L'allumage du prémélange est réalisé au centre de la cellule par une décharge haute tension entre deux électrodes en tungstène d'un diamètre de $1.5 mm$ dont les pointes sont espacées par une distance de l'ordre du millimètre. Il est réalisé par un système d'allumage automobile classique : une bobine crayon NGK PLZKBR7A-G. La modification du temps de charge de la bobine permet d'ajuster l'énergie déposée pour minimiser les impacts liés à l'allumage. Un temps de charge total permet d'atteindre l'énergie maximale de $95 mJ$. Une étude complète sur l'allumage associé à ce dispositif et son impact sur les flammes de prémélange est proposée dans la thèse B. Galmiche [161]. Pour les résultats présentés dans la suite de ce manuscrit, le temps de charge de la bobine a été fixé à $3.5 ms$, correspondant à un temps de charge total. Le rayon minimal de flamme non impactée par l'allumage est ajusté en conséquence.

Pour la mise en place de diagnostics optiques, cette cellule permet d'installer en vis-à-vis jusqu'à quatre hublots plans en quartz de section circulaire, d'un diamètre $d_{hub} = 70 mm$ et

d'épaisseur $e_{hub} = 60 \text{ mm}$. L'implantation de ces hublots est présentée sur la figure 5.1. Lorsqu'un accès optique n'est pas nécessaire, des blocs en acier inoxydable pleins, dont la surface intérieure reproduit à l'identique un hublot en quartz et sa bride de maintien, sont installés.

La cellule dispose de plusieurs accès pour l'installation de capteurs de température ou de pression par exemple. S'ils ne sont pas utilisés, un bouchon est placé sur ces accès et assure une parfaite étanchéité de la chambre. Ces bouchons sont aussi illustrés sur la figure 5.1.

Enfin, les conditions thermodynamiques avant allumage sont contrôlées à l'aide d'un capteur de pression piezo-électrique et un thermocouple de type K. La déviation maximale entre la pression mesurée et la consigne est de l'ordre de 1%. Et les fluctuations de température sont comprises dans un intervalle de $\pm 2 \text{ K}$ autour de la température de consigne.

5.1.2 Mesure dynamique de la pression

Afin de suivre l'évolution de la pression pendant la propagation du front de flamme, la cellule est équipée d'un second capteur de pression piezo-électrique *Kistler 7001*. Ce capteur a été sélectionné pour respecter les contraintes suivantes :

- il présente un faible encombrement et peut donc être placé sur la cellule de mesure sans modification.
- il résiste à des pressions de 350 bar et au pic de température créé par la flamme. Il peut ainsi être monté directement dans l'enceinte de la cellule pour éviter toutes atténuations ou perturbations sur la mesure du signal de pression possiblement induite par un système de déport du capteur.
- il conserve une réponse linéaire lorsqu'il est couplé à des diagnostics rapides, allant jusqu'à une fréquence d'acquisition de 10 kHz . La figure 5.2 schématise la réponse classique d'un capteur piezo-électrique en fonction de la fréquence. L'intervalle quasi-linéaire exploitable de ce type de capteur étant de l'ordre de $1/3$ de la fréquence naturelle du capteur, tout capteur doit présenter une fréquence naturelle supérieure à 30 kHz pour être utilisé sur la configuration existante. Ce qui est le cas avec le capteur *Kistler 7001* puisque sa fréquence naturelle est de 70 kHz .
- il conserve une forte sensibilité aux évolutions de pression avec 80 pC/bar . En effet, la sensibilité du capteur doit être maximale dans cette configuration car l'augmentation de pression dans les premiers instants de propagation du front de flamme est très faible ($\Delta P < 0.01 \text{ bar}$), puisque le volume de gaz brûlés est très petit devant le volume total

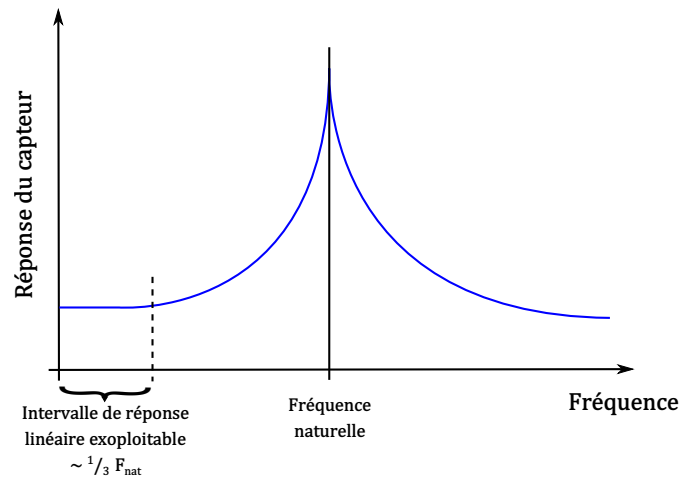


FIGURE 5.2 – Schéma de la réponse d'un capteur piezo-électrique en fonction de la fréquence d'acquisition.

de la cellule.

Ce capteur est couplé à l'aide d'un câble blindé et isolé à un amplificateur de charge *Kistler* type 5011, dont les réglages sont sélectionnés pour éviter toutes modifications du signal pendant l'amplification et/ou le filtrage. Au final, ce dispositif de mesure de la pression dynamique est le plus adapté au dispositif existant.

5.1.3 Méthode de préparation du mélange combustible

La technique utilisée pour remplir la cellule est basée sur le calcul de la masse à injecter de chaque gaz composant le mélange combustible. Elle est comparable à la méthode des pressions partielles ou la quantité de gaz injectée est déterminée à partir de la pression dans l'enceinte. La cellule est équipée d'une pompe à vide qui effectue un vide primaire pour atteindre une pression résiduelle inférieure à 0.003 *bar* dans l'enceinte. Une fois le vide effectué, elle est remplie en injectant la quantité nécessaire de chaque gaz pour créer le mélange combustible. Ces quantités sont calculées à partir des fractions molaires de chacun et converties en masse en fonction des conditions thermodynamiques à atteindre dans la cellule à partir de la loi des gaz parfaits. Pour effectuer des mélanges carburant/air, un air synthétique composé de 79.1% de N_2 et de 20.6% de O_2 est utilisé. L'emploi d'un air synthétique permet de connaître avec précision la fraction molaire d'oxygène pour calculer la richesse du mélange et la masse de chaque gaz à injecter. Cette masse est régulée à l'aide de débitmètres massiques thermiques (TMFC) dédiés *BROOKS* 5850S. Ils fonctionnent sur le principe de dissipation de la chaleur sur un fil chaud dans un écoulement

laminaire pour déterminer le débit massique Q comme fonction de la capacité thermique du gaz et des conditions thermodynamiques (P et T) en amont du débitmètre, exprimée avec un facteur de calibration K , par la relation :

$$U_{signal} = KC_p Q. \quad (5.1)$$

Ce type de débitmètre nécessite une calibration très fine et le facteur de calibration K , à appliquer pour chaque gaz et associé aux conditions de pression et température en amont, n'est pas forcément constant sur toute la plage de fonctionnement d'un débitmètre. La régulation du débit est effectuée par PID et l'incertitude donnée par le constructeur est $\Delta Q = (0.7\% \text{ débit mesuré} + 0.2\% \text{ de la pleine échelle})$. Afin de s'assurer du bon fonctionnement des débitmètres, des tests d'injection de gaz purs sont réalisés et la pression obtenue en fin d'injection dans la cellule est comparée à la pression théoriquement atteinte lorsque la masse injectée occupe le volume de l'enceinte pour les conditions thermodynamiques (P et T) cibles. Lors de l'injection, les débitmètres s'ouvrent jusqu'à leur débit maximal. Ils sont par exemple respectivement de 0.5 NL/min et de 4 NL/min pour les carburants gazeux et l'air synthétique. Ils régulent leur débit uniquement avant d'atteindre la masse totale à injecter pour être au plus près de la valeur consigne. Ainsi, toute la plage de régulation des débitmètres est exploitée. Dans le cas d'un mélange comportant plusieurs gaz, les débits maximum de chaque gaz peuvent être ajustés de telle manière que l'injection de chacun se termine dans l'ordre croissant de leur pression partielle pour optimiser au mieux l'homogénéisation du mélange dans la cellule. Dès lors, l'incertitude donnée par le constructeur ne correspond pas à celle des expériences car les débitmètres ne sont pas utilisés comme régulateur mais comme compteur. Pour estimer l'incertitude sur la richesse, des mesures ont été effectuées par chromatographie en phase gazeuse. Les résultats sont présentés dans le chapitre 7. Pendant l'injection des gaz, un ventilateur dans la chambre tourne en permanence pour assurer l'homogénéité du prémélange. Lorsque tous les gaz ont été injectés, l'agitateur est arrêté et un temps de repos d'au minimum 5 secondes est appliqué avant que la commande d'allumage soit envoyée au dispositif. Il permet d'éviter toute perturbation sur la propagation du front de flamme laminaire.

De plus, il est possible de placer un ensemeur de gouttes sur la canalisation d'injection des gaz afin d'ajouter des gouttes d'huile, ou d'un autre liquide, au mélange combustible. Les gouttes alors présentes peuvent être utilisées pour :

- effectuer des mesures de position du front de flamme par tomographie ou de vélocimétrie par image de particules. Ces diagnostics optiques n'ont pas été utilisés sur ce dispositif.

En revanche, ils sont appliqués sur le dispositif expérimental au laboratoire CORIA et seront présentés en détail dans le chapitre 6.

- étudier l’impact de la présence de particules sur la propagation du front de flamme. En effet, leur évaporation au passage du front de flamme peut induire un ballast thermique ou bien un ajout de carburant si les gouttes sont générées avec un carburant liquide qui modifie la richesse locale.

5.2 Diagnostics optiques

Comme il a été exposé précédemment, la cellule dispose de plusieurs accès optiques permettant la mise en place de différentes techniques de mesure. Au cours de cette thèse, deux techniques ont été employées sur ce dispositif : l’ombroscopie et la diffusion Rayleigh. Leur principe et les paramètres qu’ils permettent de mesurer sont présentés dans les sections suivantes.

5.2.1 Diagnostic optique 1 : la technique d’ombroscopie

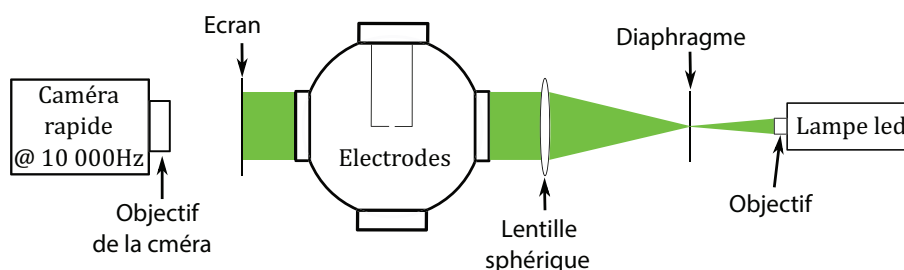
La technique d’ombroscopie est utilisée pour visualiser la propagation du front de flamme. Cette technique non intrusive permet d’identifier un rayon de flamme R_f , permettant à son tour de pouvoir estimer la vitesse de propagation absolue $S_f = \frac{dR_f(t)}{dt}$ et l’étirement total κ (Eq. 3.6) du front de flamme nécessaire à l’évaluation de la vitesse de combustion laminaire $\tilde{S}_{d,b}$, par l’équation 3.46.

5.2.1.1 Présentation de la technique

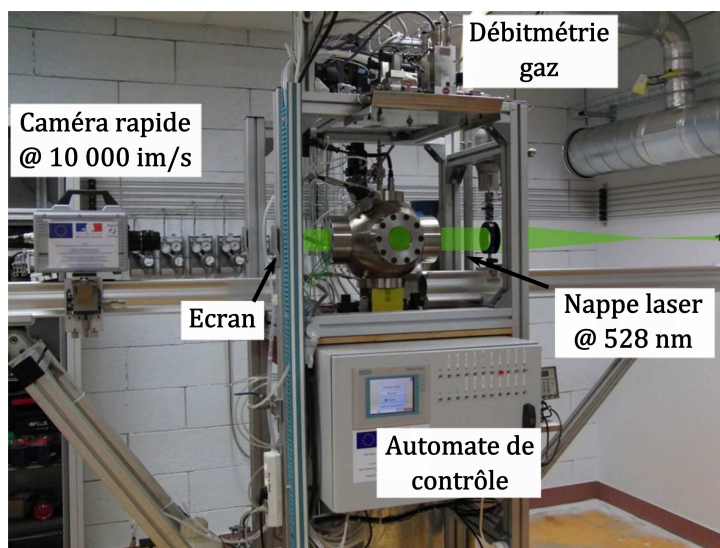
La technique d’ombroscopie repose sur l’observation de variation d’indice de réfraction au travers d’un milieu transparent. Un front de flamme peut être considéré comme un milieu transparent pour la lumière où s’opère une transition entre deux états thermodynamiques distincts : les gaz frais et les gaz brûlés. Il se caractérise donc par un fort gradient de température, associé à une variation de la masse volumique des gaz. Cette dernière est reliée à une modification de l’indice de réfraction local par la relation de *Gladstone-Dayle*. Ainsi le faisceau d’une source lumineuse qui traverse un front de flamme subit une déformation en sortant de celui-ci. Cette déformation est observée par projection sur un écran en aval de la cellule de mesure. Sur cet écran, l’éclairement relatif projeté est proportionnel à la dérivée seconde des gradients transverses de l’indice de réfraction et la localisation du front de flamme est alors

réalisable, comme illustré sur la figure 5.4.

La figure 5.3 présente la mise en place de cette technique sur la cellule de mesure avec un schéma et une vue d'ensemble du banc d'essai.



(a) Schéma



(b) Vue d'ensemble

FIGURE 5.3 – Dispositif expérimental dédié à la technique d'ombroscopie au laboratoire PRISME.

Le dispositif est composé d'une lampe LED (Light-Emitting Diode) haute performance DLR IL104G *HARDsoft*, couplée à un objectif HSO-PL-360. Ils fournissent une lumière incohérente et continue à la longueur d'onde $\lambda = 528 \text{ nm}$ très stable, en intensité comme en distribution spatiale, sans phénomène d'interférences. Un diaphragme de 3 mm est placé en sortie de la lampe pour simuler une source ponctuelle. Ce diaphragme est aussi placé dans le plan focal objet d'une lentille sphérique pour obtenir un faisceau parallèle d'un diamètre de 70 mm , correspondant à la largeur des accès optiques, qui traverse la cellule de part en part par deux hublots montés en

vis-à-vis. L'ensemble du faisceau lumineux est projeté sur un écran faiblement opaque (papier calque) placé en sortie de la cellule, où la succession d'une zone lumineuse puis sombre identifie la position où les rayons sont déviés par les changements d'indice de réfraction. Au final, la propagation du front de flamme est enregistrée à l'aide d'une caméra rapide *Photron Fastcam SA5* équipée d'un objectif *Nikkor* d'une focale de 500 mm . Cette caméra est synchronisée par rapport à la commande d'allumage et fonctionne à une vitesse d'acquisition de $10\,000\text{ img/s}$ avec une résolution spatiale de $512 \times 512\text{ pixels}^2$ sur 12 bits . Le grandissement de ce dispositif est de 0.143 mm/pixel . La figure 5.4 et l'animation 5.5 présentent les images enregistrées par ce dispositif de la propagation laminaire sphérique du front flamme d'un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions thermodynamiques initiales $P = 1\text{ bar}$ et $T = 298\text{ K}$.

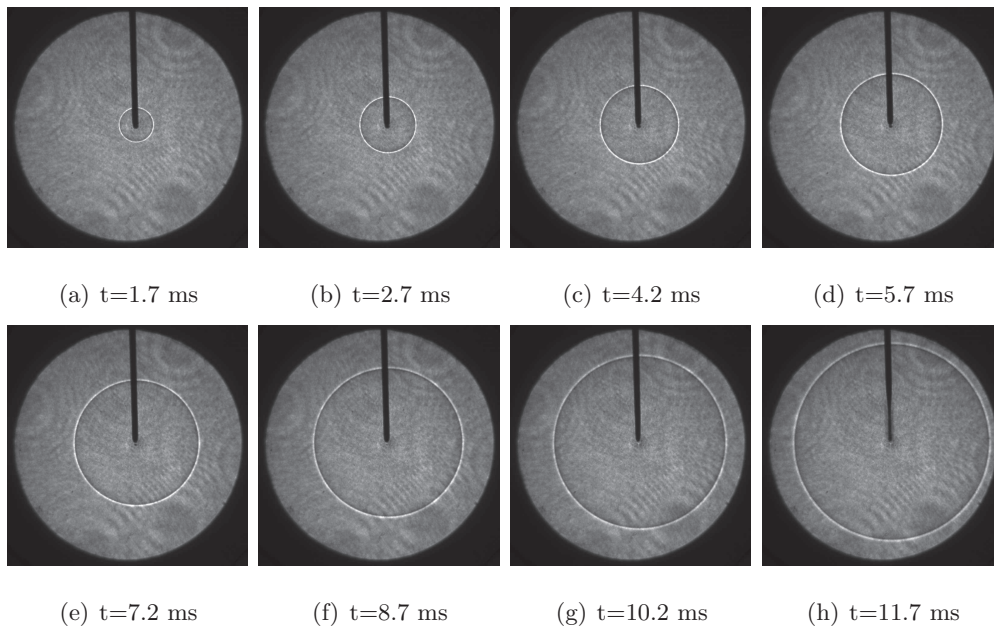


FIGURE 5.4 – Visualisation de la propagation d'une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions thermodynamiques initiales $P = 1\text{ atm}$ et $T = 298\text{ K}$, enregistrée par la technique d'ombroscopie.

FIGURE 5.5 – Animation de la propagation d’une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions thermodynamiques initiales $P = 1 \text{ atm}$ et $T = 298 \text{ K}$ enregistrée par ombroscopie. *En version pdf, appuyez sur \triangleright pour lancer l’animation.*

5.2.1.2 Identification du rayon de flamme

Le post-traitement des images enregistrées par ombroscopie commence par la soustraction du bruit de fond sur chacune. La position du front de flamme est alors détectée par les modulations de l'éclairement de l'écran à l'iso-surface où le gradient de température est maximal, c'est-à-dire où la dérivée seconde de la température en fonction de la position est nulle. Cette iso-surface est située à l'interface entre une zone lumineuse et une zone sombre. La figure 5.6 représente ce traitement. L'iso-surface où le gradient de température est maximal y est représentée par le contour rouge.

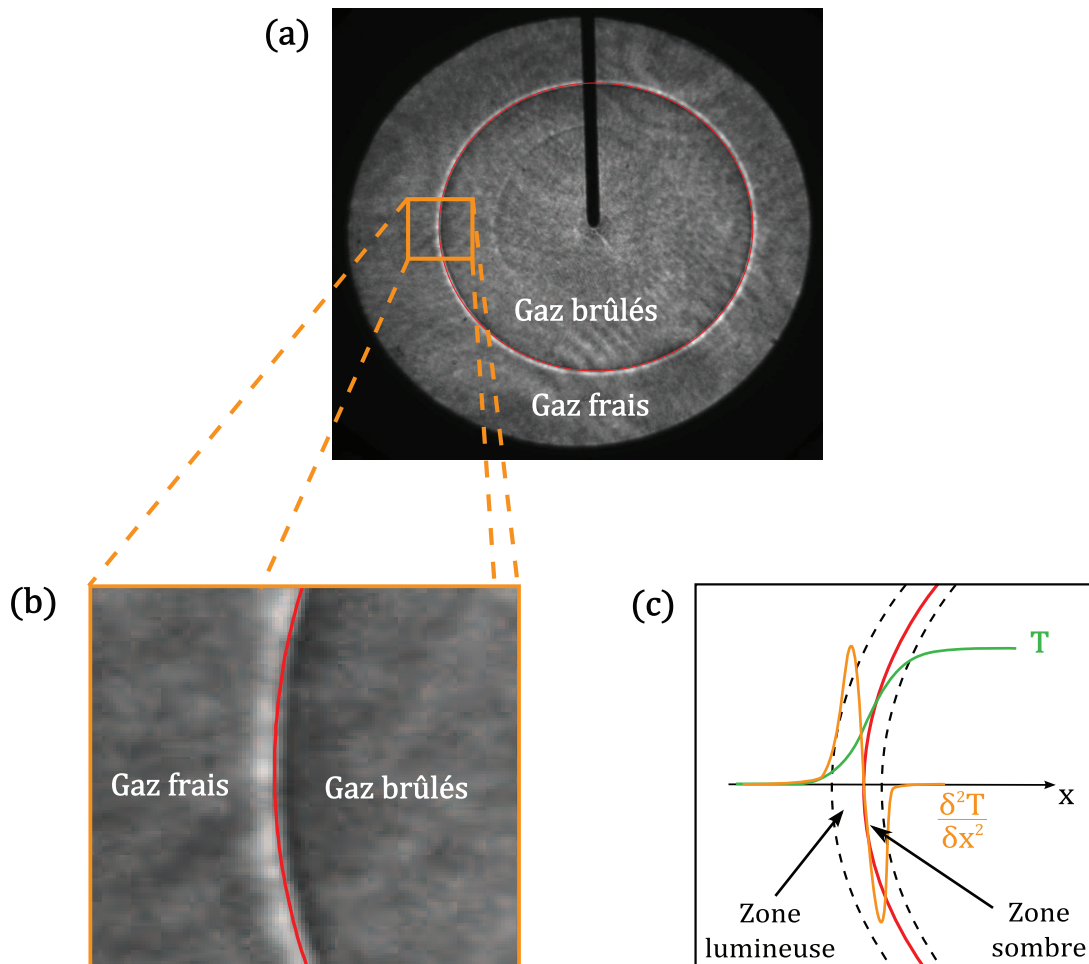


FIGURE 5.6 – Schéma de détection du rayon de flamme par la technique ombroscopie.

Après cette étape de détection, un cercle est ajusté sur le contour pour extraire le rayon de flamme R_f à l'aide d'une méthode des moindres carrés. L'extraction des rayons de flammes est limitée à l'intervalle : $8 < R_f < 20 \text{ mm}$. Dans cette intervalle, les effets de l'allumage

sont négligeables et la pression peut être considérée constante puisque $R_{f,max} < \frac{1}{3}R_0$, avec $R_0 = 100 \text{ mm}$ le rayon interne de la cellule. Au final, l'évolution temporelle de ce rayon de flamme permet de définir la vitesse de propagation absolue du front de flamme, $S_f = \frac{dR_f}{dt}$ et son étirement total, $\kappa = \frac{2}{R_f} \frac{dR_f}{dt} = \frac{2}{R_f} S_f$ Eq. 3.6.

5.2.2 Diagnostic optique 2 : la diffusion Rayleigh

L'objectif des mesures par diffusion Rayleigh est de pouvoir estimer le profil temporel de température instationnaire en un point de la cellule pendant la propagation d'une flamme. Ces mesures permettent d'estimer l'état thermodynamique local et son évolution temporelle. Ces paramètres sont de première importance dans les gaz brûlés, notamment pour déterminer la vitesse de combustion laminaire $\tilde{S}_{d,b}$ (Eq. 3.16) avec précision. Pour rappel, son expression, classiquement utilisée à partir de données expérimentales, est développée telle que :

$$\tilde{S}_{d,b} = \frac{\rho_b}{\rho_u} \frac{dR_f}{dt} \approx \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u(t=0)} \frac{dR_f}{dt}.$$

Dans la dernière expression, les densités ρ_b^{eq} et $\rho_u(t=0)$ peuvent être déterminées à partir d'un programme d'équilibre chimique adiabatique pour permettre une résolution expérimentale de cette équation. Cependant, les gaz brûlés ne sont pas nécessairement à cet équilibre et donc $\rho_b \neq \rho_b^{eq}$. Le dispositif introduit a pour but de mettre en avant cette différence d'état thermodynamique et les paramètres influents sur celui-ci.

5.2.2.1 Présentation de la technique

La diffusion Rayleigh est un processus de collision élastique entre les photons et les molécules. Il se caractérise par la diffusion d'un rayonnement de même longueur d'onde que le rayonnement incident qui le génère, sans échange d'énergie entre les photons incidents et les molécules. La propagation de la lumière peut être représentée par la propagation d'une onde électromagnétique qui, lorsqu'elle rencontre une particule, déforme son nuage électronique. Ainsi, le barycentre des charges négatives se décale du barycentre des charges positives proportionnellement à la longueur d'onde du rayon incident. La molécule va alors se comporter comme un dipôle oscillant et générer un champ électromagnétique de même longueur d'onde que le rayonnement incident. Mais son émission ne sera pas la même dans toutes les directions et le système de collection du signal Rayleigh doit être placé en prenant en compte la polarisation du faisceau incident. De plus, pour générer ce type de diffusion, la taille des molécules, d_p , doit être très inférieure à la longueur

d'onde du rayonnement incident : $d_p \ll \lambda$. D'après *Zhao & Hiroyasu* [162], si le diamètre de la particule est supérieur au dixième de la longueur d'onde λ , alors c'est le régime de diffusion de Mie qui s'observe. Il sera discuté dans le chapitre 6 avec la présentation des méthodes de tomographie et de vélocimétrie par image de particules.

La diffusion Rayleigh est donc une technique de mesure instantanée non intrusive. Mais son rayonnement peut être sujet à de nombreuses interférences, notamment les réflexions intenses de particules (diffusion de Mie de poussières ou gouttes) ou de parois. En effet, les réflexions induites par diffusion de Mie sont beaucoup plus intenses que le signal Rayleigh et il peut exister un facteur allant jusqu'à 10^{20} entre les deux. Ce type de mesure doit donc être réalisé dans un volume confiné avec des gaz filtrés en évitant toutes réflexions pour écarter toute lumière parasite. La puissance du signal Rayleigh seul s'exprime alors dans le cas d'un mélange contenant n espèces comme :

$$S_R = C.I_0(\lambda).N_d(x,y).\Omega.l.\left(\sum_{i=1}^n \chi_i \sigma_i\right), \quad (5.2)$$

avec :

- C un facteur expérimental fonction de la géométrie et de l'efficacité du système de collection,
- $I_0(\lambda)$ la puissance du rayonnement incident à la longueur d'onde λ en Watt,
- $N_d(x,y)$ la densité moléculaire locale en m^{-3} , telle que $N_d = \frac{P}{kT}$ à partir de la loi des gaz parfaits,
- Ω l'angle solide de collection,
- l la longueur du volume de mesure en m , comme illustré sur la figure 5.7,
- χ_i la fraction molaire de l'espèce i ,
- et σ_i la section efficace de diffusion Rayleigh de l'espèce i en m^{-2} .

Ainsi, le signal Rayleigh est proportionnel à la pression : $S_R \propto P$ et inversement proportionnel à la température : $S_R \propto \frac{1}{T}$. Or il présente un facteur ~ 8 d'intensité entre les gaz frais et les gaz brûlés pour une flamme stoechiométrique de CH_4/air . En effet, la densité des gaz brûlés est ~ 8 fois inférieure à celle des gaz frais et donc la quantité de photons diffusés est fortement diminuée. La mesure et l'exploitation du signal de diffusion Rayleigh dans les gaz brûlés sont donc beaucoup plus compliquées et sensibles aux incertitudes que dans les gaz frais.

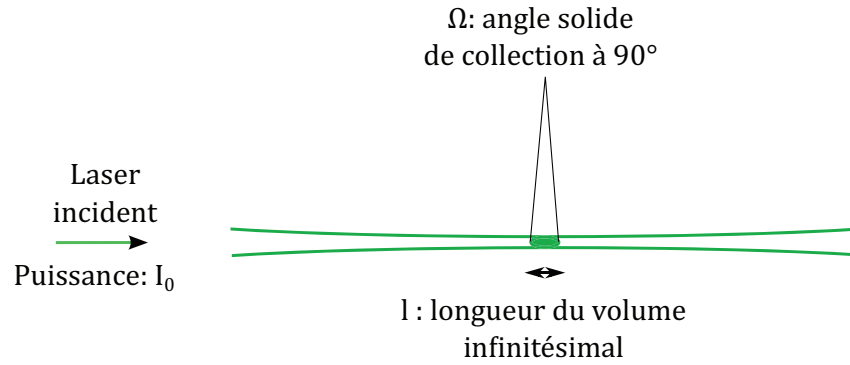


FIGURE 5.7 – Schéma de principe du volume de mesure ponctuel des signaux de diffusion Rayleigh.

5.2.2.2 Calcul de la section efficace de diffusion Rayleigh

La section efficace est définie comme le rapport entre la puissance diffusée par unité d'angle solide et l'irradiance, la puissance du rayonnement incident par unité de surface. Elle s'exprime pour une espèce i en (sr/m) par l'équation :

$$\sigma_i = \frac{4\pi^2}{\lambda^4} \left(\frac{n_i - 1}{N_0} \right)^2 \sin^2 \theta \frac{3}{3 - 4\alpha_i}, \quad (5.3)$$

avec

- λ la longueur d'onde du rayonnement incident,
- n_i l'indice de réfraction molaire de la molécule i aux conditions locales,
- $N_0 = PA_0/RT$ le nombre de Loschmidt, représentant la densité molaire aux conditions locales P et T avec A_0 le nombre d'Avogadro et R la constante des gaz parfaits,
- θ l'angle de diffusion défini comme l'angle entre la direction de polarisation et la direction d'observation,
- α_i le facteur de dépolarisation qui caractérise l'anisotropie de la molécule.

Zhao & Hiroyasu [162] ont montré que pour un grand nombre de molécules rencontrées dans les processus de combustion, le facteur de dépolarisation peut être considéré nul : $\alpha_i = 0$. Dès lors, dans une configuration où le système de collection du signal Rayleigh est placé à 90° par rapport au signal incident, l'expression de la section efficace pour un gaz pur composé de molécules isotropes est :

$$\sigma_i = \frac{4\pi^2}{\lambda^4} \cdot \left(\frac{n_i - 1}{N_0} \right)^2. \quad (5.4)$$

L'indice de réfraction de chaque espèce est déterminé à partir de l'équation de *Lorenz-Lorentz* reliant l'indice de réfraction et la réfractivité molaire $R_{L,i}$ par :

$$n_i = \left(\frac{1 + 2\rho_m R_{L,i}}{1 - \rho_m R_{L,i}} \right)^{1/2}, \quad (5.5)$$

avec ρ_m la densité molaire. Les réfractivités molaires de chaque espèce étudiée dans cette thèse ont été extraites de [163]. Le tableau 5.1 répertorie leur valeur ainsi que la valeur de l'indice de réfraction et la section efficace de diffusion Rayleigh associée pour les conditions thermodynamiques : $P = 1 \text{ atm}$ et $T = 295 \text{ K}$.

Espèces	$R_{L,i} \text{ (cm}^3/\text{mol)}$	n_i	$\sigma_i \text{ (*}10^{-28} \text{ cm}^2)$
<i>He</i>	0.522	1.000032338	0.083276
<i>H₂</i>	2.086	1.000129230	1.329904
<i>CH₄</i>	6.630	1.000410757	13.43567
<i>O₂</i>	4.065	1.000251837	5.050455
<i>N₂</i>	4.484	1.000277797	6.145318
<i>H₂O</i>	3.782	1.000234304	4.371695
<i>CO₂</i>	6.690	1.000414474	13.67997
<i>OH</i>	5.333	1.000342789	9.357156
<i>CO</i>	5.034	1.000311873	7.745411

TABLE 5.1 – Réfractivité molaire, indice de réfraction et section efficace de diffusion Rayleigh de différents gaz dans les conditions thermodynamiques : $P = 1 \text{ atm}$ et $T = 295 \text{ K}$ et pour une longueur d'onde incidente de $\lambda = 532 \text{ nm}$.

De plus, d'après *Zhao & Hiroyasu* [162], la variation de la section efficace différentielle de diffusion Rayleigh est très faible avec la température. Elle est induite par l'augmentation du volume des molécules, due au déplacement de la population des niveaux rotationnels et vibrationnels du nuage électronique vers les niveaux supérieurs avec la température. Les auteurs rapportent une évolution inférieure à 4% de σ_i pour le méthane entre 300 et 2000 K et que cette valeur est similaire, voire supérieure, à celle de la plupart des molécules simples. Les sections efficaces répertoriées dans le tableau 5.1 seront donc considérées constantes quelle que soit la température au point de mesure.

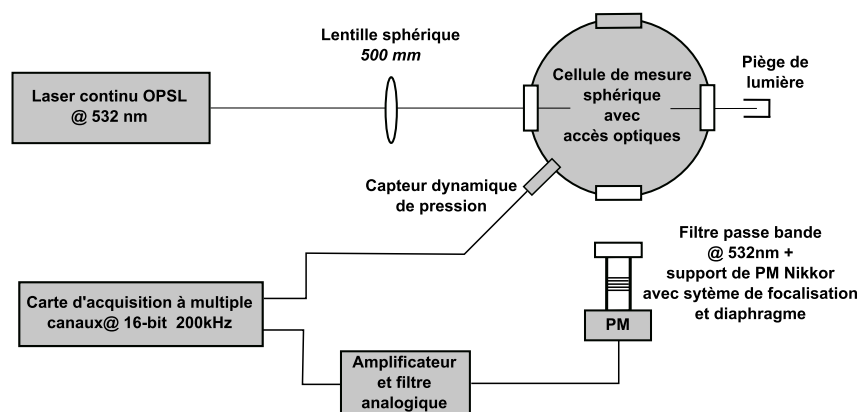
Au final, le signal de diffusion Rayleigh (Eq. 5.2) s'exprime à partir de plusieurs paramètres : la température, la pression et la composition locale des gaz. Ainsi, l'objet des mesures étant de

déterminer la température, il est nécessaire de connaître la pression et la composition locale. Si l'évolution de pression peut être considérée négligeable dans les premiers instants de propagation de la flamme, la composition locale des gaz reste à connaître. C'est un point crucial qui conditionne directement la précision des résultats extraits de ce type de mesure. C'est pourquoi, l'exploitation de mesures par diffusion Rayleigh est de plus en plus couplée à des mesures par diffusion Raman spontanée [164]. Il s'agit d'une technique de mesure optique non intrusive basée sur un processus de collision inélastique qui permet d'identifier les molécules présentes dans un volume de contrôle infinitésimal ainsi que leur concentration. Cependant ce phénomène de diffusion est très faible, avec un signal 10^{14} fois moins intense que le rayonnement incident le générant. Il nécessite donc un dispositif expérimental très spécifique et coûteux, comportant un ou plusieurs lasers très puissants pour conduire à une irradiance locale suffisante pour observer ce phénomène. Dès lors, pour effectuer des mesures dans une enceinte close, optiquement accessible par des hublots, l'utilisation de très puissants faisceaux lumineux pose problème car ils peuvent endommager ces accès. L'accès à ces dispositifs particuliers et les problèmes qu'ils engendrent ont conduit au choix d'effectuer uniquement des mesures par la technique de diffusion Rayleigh. Deux approches de traitement des signaux mesurés sont alors possibles :

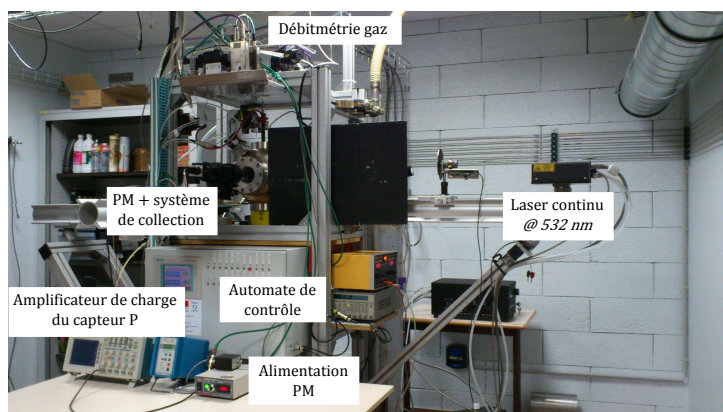
- En première approche, le profil temporel est résolu en considérant deux parties distinctes au cours du temps : les gaz frais et les gaz brûlés, sans prendre en compte l'épaisseur du front de flamme et les phénomènes qui s'y opèrent. Le front de flamme est considéré comme une interface séparant les deux domaines d'études où le rapport des sections efficaces de diffusion Rayleigh est appliqué. La composition des gaz frais est supposée constante et égale à la composition initiale du mélange. Tandis que la composition des gaz brûlés est estimée par un solveur à l'équilibre chimique adiabatique. Cette hypothèse réduit fortement les types de mélanges qui peuvent être étudiés par ce traitement.
- En deuxième approche, des simulations DNS sont réalisées avec le code A-SURF, présenté au chapitre 4, qui reproduisent la configuration expérimentale. Elles permettent de reconstruire des signaux Rayleigh synthétiques comparables directement aux mesures expérimentales. Dans ce cas, tous types de mélanges combustibles peuvent être étudiés, mais ce traitement nécessite alors la réalisation de simulations DNS reproduisant la configuration expérimentale de flamme.

5.2.2.3 Matériel et configuration

Le dispositif expérimental utilisé pour les mesures ponctuelles de diffusion Rayleigh est schématisé et présenté monté sur le banc d'essai dans la figure 5.8.



(a) Schéma



(b) Vue d'ensemble

FIGURE 5.8 – Dispositif pour la mesure de profils de rayonnement par diffusion Rayleigh.

Le rayonnement incident provient d'un laser OPSSL continu *COHERENT* Verdi G15, réglé pour délivrer une puissance de 12 W à la longueur d'onde $\lambda = 532\text{ nm}$ en sortie. Une lentille sphérique, d'une distance focale $f = 500\text{ mm}$, est placée sur le chemin optique pour focaliser le rayon laser en un point P à $20 \pm 1\text{ mm}$ du point d'allumage, contenu dans un plan traversant la cellule par son centre. Cette distance, comparable à un rayon de flamme, est contenue dans l'intervalle de mesure exploitable où les effets de l'allumage ou du confinement sont négligeables. Pour limiter l'introduction de lumière parasite dans la cellule, le faisceau laser est introduit par un hublot de taille réduite à 10 mm , représenté sur la figure 5.9. Un hublot de même dimension est utilisé pour la sortie. Mais il est monté sur une bride inclinée qui oriente le rayonnement

réfléchi vers une succession de pièges à lumière pour ne pas introduire de rayonnement réfléchi dans la cellule de mesure. De plus, tous les éléments démontables de la cellule, comme les hublots

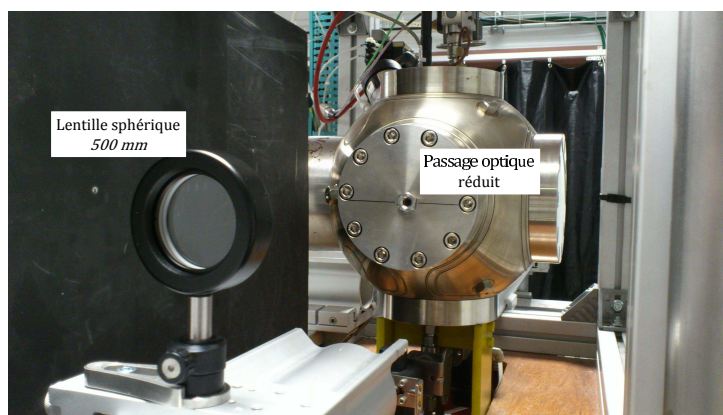


FIGURE 5.9 – Vue du passage optique réduit pour l'introduction du laser.

pleins, sont peints à l'aide d'une peinture noir résistante aux hautes températures pour limiter l'impact des réflexions résiduelles dans la cellule. Au final, le rayon en sortie de la cellule est bloqué dans un piège de lumière.

Afin d'introduire les gaz sans particules, deux filtres sont montés en série sur la canalisation d'injection. Le premier est un filtre *Swagelok*, référence 590288001, composé d'un tamis en acier filtrant les particules de taille supérieure à $2 \mu\text{m}$. Le second est aussi un filtre *Swagelok*, référence SCF3-VR4-P-30, constitué quant à lui d'un poreux en céramique qui filtre les particules de taille supérieure à $0.003 \mu\text{m}$. La possibilité d'un phénomène de diffusion de Mie est donc réduit à son minimum.

Le système de collection est composé d'un photomultiplicateur (PM) *Hamamatsu* C6780-20 placé à 90° par rapport au rayon incident. Il est positionné sur un système de focalisation *Nikkor* fixe, focalisé sur le point P. Par conséquent, les signaux mesurés sont bien relatifs à une évolution temporelle en un point. Des mesures avec une résolution spatiale 2D, nécessitant un dispositif plus complexe et des post-traitements lourds et adaptés, n'ont pas été réalisées. Le PM collecte le signal à travers un hublot classique de la cellule, d'un diamètre de 70 mm . Un filtre passe-bande, à 532 nm avec une largeur de bande de $1.5 \pm 0.3 \text{ nm}$, est positionné devant le dispositif de collection pour éliminer les interférences du milieu environnement et limiter l'impact de la chimiluminescence (émission des radicaux CH^* principalement). Le signal sortant du PM est amplifié à l'aide d'un amplificateur *Hamamatsu* C7319 réglé sur un gain $G = 10^6$. Il forme avec le PM un système spécialement adapté à la détection des signaux de très faible intensité.

Afin de supprimer le bruit haute fréquence, le signal est ensuite filtré par un filtre analogique de Butterworth réglé à une fréquence de coupure de 5 kHz . Enfin, un dernier amplificateur est utilisé pour ajuster l'amplitude du signal sur toute la plage d'utilisation ($0 \rightarrow 10\text{ V}$) de la carte d'acquisition. Il s'agit d'une carte *National Instrument USB-6212* avec une dynamique de 16-bits. Elle est contrôlée par un programme *LabView* et réglée pour enregistrer le signal du PM à une fréquence d'acquisition de 200 kHz .

La validité de cette configuration filtrage et amplification pour enregistrer un signal est illustrée sur la figure 5.10. Elle présente, pour deux différents réglages, le signal normalisé de diffusion Rayleigh mesuré à l'aide du dispositif sur une flamme CH_4/air à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression. La figure 5.10 montre qu'aucune mo-

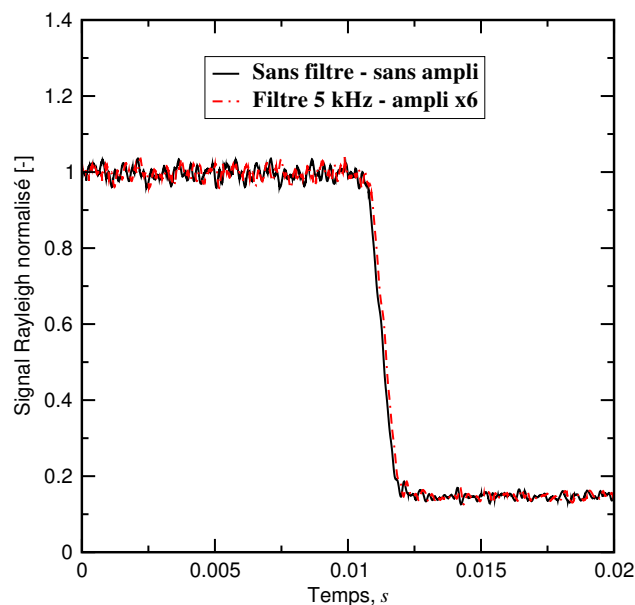


FIGURE 5.10 – Superposition de plusieurs signaux Rayleigh normalisés pour différents réglages du dispositif de mesure en fonction du temps sur une flamme CH_4/air à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression.

dification ou distorsion entre les deux signaux n'est observable. L'utilisation d'un filtrage et d'une amplification analogique n'introduit donc pas une source d'incertitude supplémentaire. Ainsi, l'ajustement du signal sur l'intégralité de la plage dynamique d'utilisation de la carte d'acquisition est valide et permet d'augmenter la précision de l'enregistrement des mesures au maximum des capacités du dispositif expérimental.

Simultanément à l'enregistrement du signal Rayleigh, le signal de pression dynamique est mesuré à la même fréquence d'acquisition. Il est utilisé pour limiter le traitement des données à une élévation de pression dans la cellule inférieure à 5 % de la valeur initiale afin de considérer l'élévation de pression négligeable lors l'exploitation des mesures. La figure 5.12 illustre un signal Rayleigh mesuré puis normalisé par la valeur moyenne dans la zone des gaz frais (en bleu sur cette figure), d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

La procédure de mesure pour chaque condition étudiée d'un mélange combustible se décompose en trois étapes :

1. Le signal Rayleigh sans éclairage du laser, noté S_χ , est enregistré à la fréquence d'acquisition de 200 kHz , synchronisé avec l'allumage, pour estimer la chimiluminescence reçu par le PM,
2. puis le signal Rayleigh est mesuré avec présence du faisceau laser lorsque la cellule est mise au vide pour estimer le bruit de fond, il est noté S_{noise} ,
3. enfin le signal Rayleigh avec éclairage du laser est enregistré pendant la propagation de la flamme pour les mêmes réglages que la chimiluminescence. Il est noté $S_{R,raw}$.

Au final, le signal Rayleigh S_R exploitable est :

$$S_R = S_{R,raw} - (S_\chi + S_{noise}). \quad (5.6)$$

5.2.2.4 Post-traitement du signal Rayleigh

5.2.2.4.1 L'estimation du profil de température locale L'équation de la puissance du signal Rayleigh (Eq. 5.2) va permettre d'estimer l'évolution de la température au cours du temps. Pour rappel, son expression est :

$$S_R = C.I_0(\lambda).N_d(x, y).\Omega.l. \left(\sum_{i=1}^n \chi_i \sigma_i \right).$$

En définissant l'état initial comme état de référence, noté 0, il est possible de définir le rapport :

$$\frac{S_R^0}{S_R} = \frac{\frac{P^0 A_0}{RT^0} \left(\sum_{j=1}^m \chi_j \sigma_j \right)}{\frac{P A_0}{RT} \left(\sum_{i=1}^n \chi_i \sigma_i \right)}. \quad (5.7)$$

où i représente les espèces présentes dans les gaz frais à l'état initial et j représente les espèces présentes au point de mesure dans les conditions P et T à un instant donné. Dès lors, si la

pression est considérée constante alors $P = P_0$ et la température au point de mesure s'exprime par :

$$T = T^0 \frac{S_R^0 \sum_j \chi_j \sigma_j}{S_R \sum_i \chi_i \sigma_i}, \quad (5.8)$$

Cette dernière équation s'écrit plus généralement sous la forme :

$$T = T^0 \frac{S_R^0}{S_R} \sigma_N, \quad (5.9)$$

avec σ_N le rapport des sections efficaces défini comme :

$$\sigma_N = \frac{\sum_j \chi_j \sigma_j}{\sum_i \chi_i \sigma_i}. \quad (5.10)$$

L'estimation de ce rapport est le point limite de la technique. En effet, elle nécessite de connaître la composition locale des espèces j qui n'est pas mesurée simultanément. Elle est donc estimée à l'aide de solveur d'équilibre chimique adiabatique. Avec cette première approche, son estimation dans le front de flamme est impossible et seule une température moyenne des gaz brûlés pour les flammes où l'hypothèse d'un état d'équilibre thermodynamique adiabatique est acceptable peut être extraite. C'est par exemple le cas pour des flammes CH_4/air . En revanche, si une simulation DNS de l'expérience est effectuée, les signaux mesurés peuvent être directement comparés à des signaux synthétiques reconstruits à partir des compositions locales accessibles numériquement. C'est cette deuxième possibilité de traitement, plus lourde car nécessitant des calculs numériques DNS précis et coûteux, qui a été sélectionnée pour étudier des mélanges ne respectant pas l'hypothèse d'équilibre chimique adiabatique dans les gaz brûlés.

5.2.2.4.2 Traitement spécifique des mélanges H_2/air Les mélanges H_2/air sont soumis à des effets de diffusion préférentielle. En effet, la diffusivité moléculaire de l'hydrogène dans ces mélanges est plus de quatre fois plus grande que celle de l'oxygène pour l'ensemble des richesses qui seront étudiées par la suite dans le chapitre 9 à la section 9.2. Cette différence impose à la flamme un comportement différent de celui des flammes où la diffusivité de chaque espèce réactive reste du même ordre de grandeur, comme les flammes CH_4/air par exemple. La composition locale sera modifiée par ces effets telle que la concentration en H_2 peut être augmentée localement, comme l'a démontré *Varea et al.* [44]. Si cette variation de composition ne modifie pas significativement la détermination de la température dans les gaz frais en amont du front de flamme, elle devient prépondérante lorsqu'on s'intéresse aux gaz brûlés en aval du front de flamme. Afin de pouvoir les prendre en compte dans l'estimation du profil temporel de température, le post-traitement suivant a été sélectionné :

- la section efficace de diffusion Rayleigh des gaz frais est supposée constante et égale à celle de la composition de la richesse initiale du mélange,
- la chimie est supposée complète et atteignant la température de fin de combustion adiabatique de la richesse locale ϕ_{loc} modifiée par la diffusion de l' H_2 ,
- un fichier répertorie en fonction de la richesse les températures adiabatiques et les sections efficaces de diffusion Rayleigh σ , calculées à l'aide d'un solveur d'équilibre chimique adiabatique,
- une boucle itérative est implémentée dans les programmes de post-traitement pour déterminer la richesse locale et la température de fin de combustion moyenne à partir des signaux Rayleigh. Son fonctionnement est illustré sur la figure 5.11.

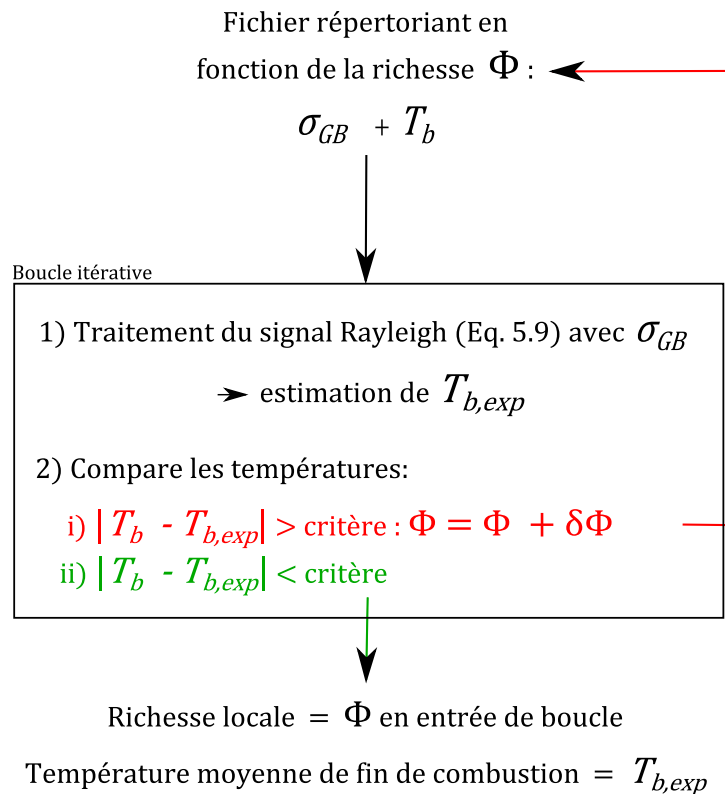


FIGURE 5.11 – Schéma de fonctionnement du traitement des signaux Rayleigh pour les mélanges H_2/air .

Au final, le profil temporel de température est retrouvé et une estimation de la richesse locale dans les gaz brûlés (moyennée dans l'intervalle de temps entre le passage du front de flamme et une élévation de la pression dans la cellule de 5 % de sa valeur initiale) est réalisée.

5.2.2.4.3 Filtrage numérique du signal brut Afin de comparer les signaux Rayleigh mesurés à des signaux numériques synthétiques, un filtrage numérique est appliqué pendant le post-traitement pour encore diminuer le bruit lié à la mesure. Il est appliqué séparément dans les zones définies par les gaz frais et les gaz brûlés. Il est effectué au moyen du logiciel *MatLab* par un filtre passe-bas de Butterworth d'ordre 4 avec une fréquence de coupure réglée à $f_c = 200 \text{ Hz}$. Il a été vérifié que cette fréquence de coupure ne modifie pas la valeur moyenne du signal dans chacune des zones (GF et GB). La figure 5.12 superpose le signal Rayleigh mesuré en sortie du filtre analogique et ce signal Rayleigh filtré numériquement par partie pour illustrer ce traitement.

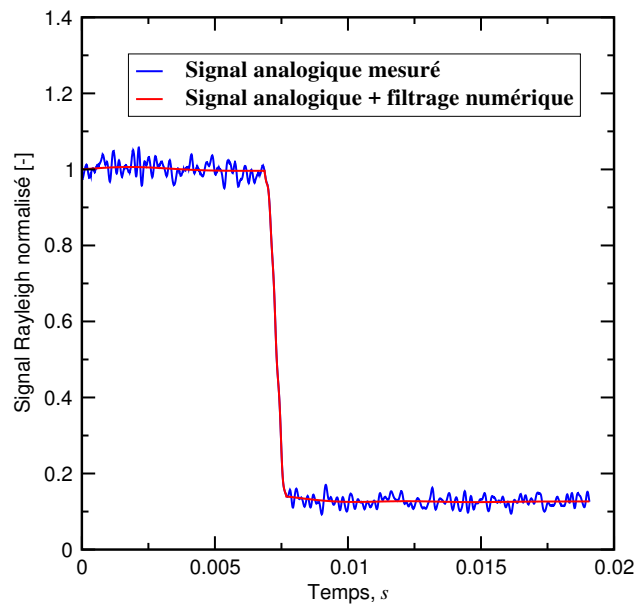


FIGURE 5.12 – Illustration du signal Rayleigh normalisé, mesuré pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

Cette figure démontre que ce dernier filtrage n'impacte pas l'estimation de la valeur moyenne des signaux dans chacune des zones (GF et GB). On peut de plus noter que dans chacune des zones, les gaz sont à l'équilibre thermodynamique pour cette flamme de CH_4/air car le signal est constant, i.e. la température du milieu n'évolue plus.

5.3 Conclusion

Au final, le dispositif expérimental présent au laboratoire PRISME permet l'étude des flammes laminaires de prémélange dans une enceinte parfaitement sphérique. Deux techniques de mesures différentes ont été mises en place :

- une première dédiée à l'étude de la propagation du front de flamme sphérique : l'ombroscopie. Elle permet de déterminer une valeur de la vitesse de combustion laminaire par la définition de $\tilde{S}_{d,b}$ (Eq. 3.46) et d'effectuer des études sur le type de mélange, les conditions thermodynamiques d'inflammation et l'impact de la présence de particules (gouttes liquides) dans le prémélange initial pour la détermination des vitesses caractéristiques de flamme.
- une seconde dédiée à l'estimation du profil de température en un point de l'enceinte : la diffusion Rayleigh. Avec une exploitation des signaux Rayleigh différente en fonction des mélanges étudiés, telle que pour les mélanges respectant l'hypothèse d'un état d'équilibre chimique adiabatique des gaz brûlés après combustion, la température est déterminée par l'équation 5.9, avec une composition des gaz brûlés déterminée à l'aide d'un solveur d'équilibre chimique adiabatique. Cette étape permet une validation du dispositif de mesure. Pour l'étude d'autres mélanges plus complexes, les signaux Rayleigh mesurés pourront être comparés directement à des signaux synthétiques, construits à partir de simulations DNS reproduisant le dispositif expérimental avec le code *A-SURF* présenté au chapitre précédent. Les résultats seront présentés et analysés dans le chapitre 9.

Chapitre 6

Dispositif expérimental au laboratoire CORIA

Ce chapitre présente le second dispositif expérimental présent au laboratoire CORIA et développé pour l'étude des flammes laminaires en expansion sphérique par *E. Varea* [165]. Il permet de mesurer simultanément le rayon de flamme et le profil de vitesse des gaz frais en amont du front de flamme. La vitesse de combustion laminaire $\tilde{S}_{d,u}$ (Eq. 3.45) est alors directement mesurable. Premièrement, les caractéristiques de l'enceinte de mesure et la méthode de préparation des mélanges sont exposés. Puis, le diagnostic optique, sa validation et le post-traitement spécifique sont détaillés.

Sommaire

6.1	L'enceinte de mesure	118
6.1.1	Présentation du dispositif	118
6.1.2	Méthode de préparation du mélange combustible	120
6.2	Diagnostic optique : la tomographie laser	122
6.2.1	Présentation	122
6.2.2	L'ensemencement	125
6.2.3	Identification du rayon de flamme	128
6.2.4	Détermination du profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme	131
6.3	Conclusion	134

6.1 L'enceinte de mesure

6.1.1 Présentation du dispositif

Le dispositif expérimental présent au laboratoire CORIA a été mis en place et éprouvé au cours de la thèse d'*E. Varea* [165] pour la détermination et l'étude des vitesses caractéristiques de flammes de prémélange en expansion sphérique. Il est construit autour d'une chambre de combustion haute pression et haute température réalisée dans un bloc d'acier inoxydable cubique. Son volume intérieur prend la forme de deux cylindres co-centriques, d'un diamètre identique $d = 90 \text{ mm}$, se croisant avec un angle de 90° . Son volume interne de 2.26 L équivaut à une sphère de rayon $R_0 = 82.5 \text{ mm}$. Elle est présentée sur la figure 6.1.

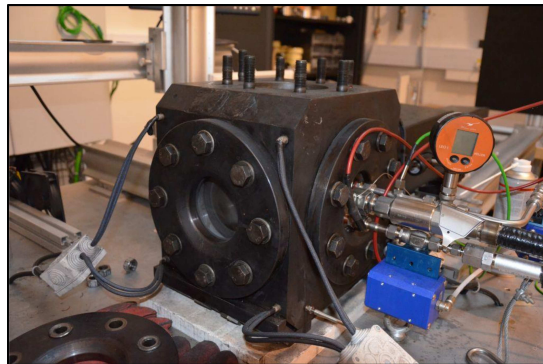
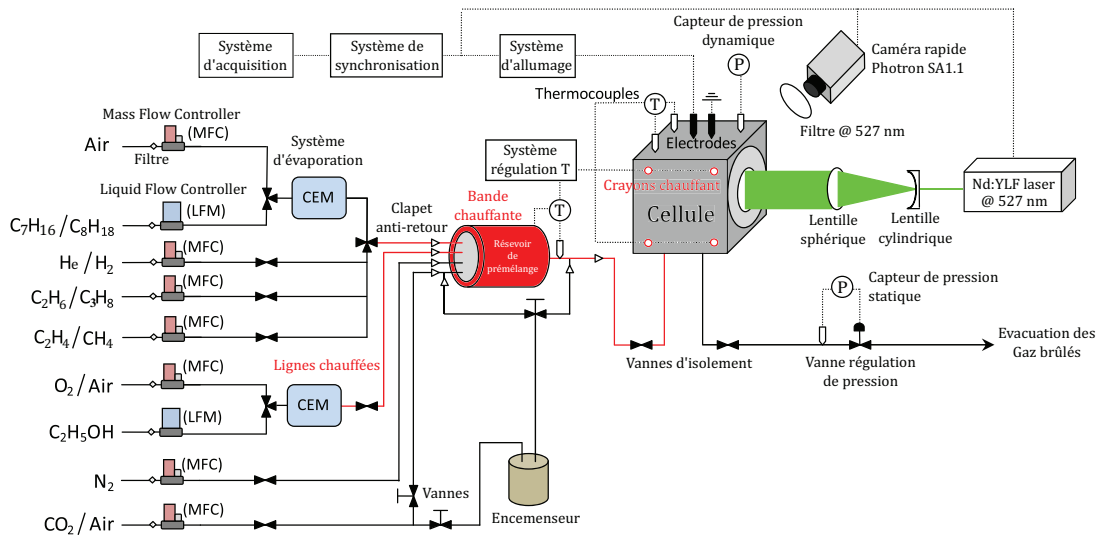


FIGURE 6.1 – Vue de la cellule de mesure présente au laboratoire CORIA.

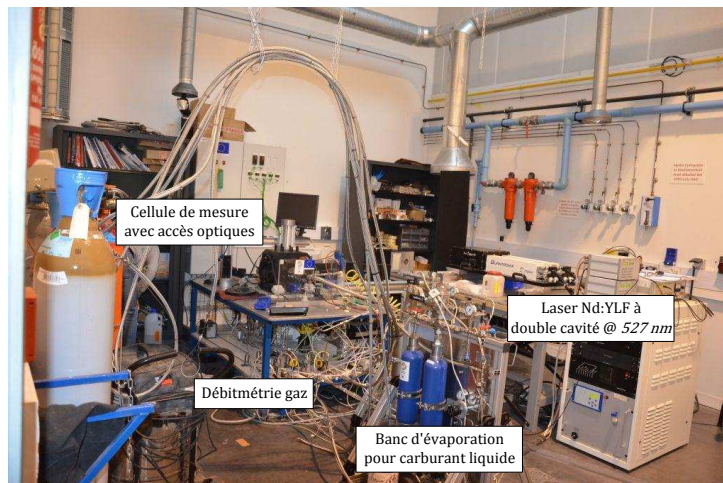
Elle permet d'étudier des prémélanges combustibles à l'état gazeux pour des conditions de température et de pression pouvant aller respectivement :

- pour la température, de la température atmosphérique à 573 K ,
- et pour la pression, de 1 à 20 bar .

Le chauffage de l'enceinte est réalisé grâce à des cartouches chauffantes et des résistances filaires contrôlées par un moniteur PID, placées dans le bloc et sur les lignes d'admissions. La pression est contrôlée à l'aide d'une vanne à fermeture variable asservie à un capteur de pression statique. Ce système permet de reproduire des conditions d'étude proches de conditions réelles des moteurs à combustion interne par allumage commandé. La figure 6.2 présente la vue d'ensemble du dispositif et un schéma avec toutes les configurations de mélanges combustibles étudiés au cours de cette thèse, que ce soit à partir de carburants gazeux ou liquides. Pour l'utilisation de carburant liquides, deux bancs d'évaporation sont à disposition.



(a) Schéma



(b) Vue d'ensemble

FIGURE 6.2 – Dispositif expérimental au laboratoire CORIA.

Lorsque les conditions thermodynamiques et l'homogénéité du mélange au sein de la cellule sont assurées, deux vannes pneumatiques isolent l'enceinte de mesure. Un temps de mise au repos de 30 s est appliqué. L'allumage de la combustion est alors réalisé au centre de la cellule par une décharge haute tension entre deux électrodes de tungstène d'un diamètre de 1 mm, dont les pointes sont espacées d'une distance de l'ordre du millimètre. Ce système a été conçu et réalisé au sein du laboratoire CORIA. Il permet d'ajuster l'énergie déposée par l'allumage en sélectionnant le temps de décharge des condensateurs par un potentiomètre à cinq positions afin de minimiser l'influence de l'allumage sur la propagation de flamme.

Pour la mise en place de diagnostics optiques, la cellule dispose de trois hublots, illustrés sur la figure 6.1, d'un diamètre extérieur $d_{ext} = 120 \text{ mm}$ pour un diamètre utile de $d_{utile} = 90 \text{ mm}$ et d'une épaisseur de 50 mm . Deux hublots sont placés en vis-à-vis et le troisième est monté à 90° par rapport à la direction reliant le centre des deux autres. L'étanchéité de la cellule est assurée par des joints en graphite montés sur chacune des faces (côté cellule et côté bride) des hublots.

Les capteurs contrôlant les conditions thermodynamiques internes sont installés sur deux blocs d'acier plein au dimension d'un hublot. Ils sont illustrés sur la figure 6.1. Pour vérifier la température, deux thermocouples de type K sont employés. L'un est positionné près de la paroi interne de la chambre. L'autre est positionné au plus près du centre de la cellule en faisant attention à ne pas gêner le diagnostic optique. Cette installation permet, en plus de contrôler la température, de confirmer qu'il n'y a pas de gradient de température au sein de la cellule.

L'évolution de la pression dynamique pendant la propagation de la flamme est enregistrée à l'aide d'un capteur piezo-électrique *Kistler* 7001, identique à celui employé au laboratoire PRISME. Il a été sélectionné sur le même cahier des charges. Ainsi les signaux de pression sont directement comparables entre les deux dispositifs expérimentaux exploités au cours de cette thèse. Ils pourront notamment permettre de statuer sur l'influence de la géométrie interne des chambres de combustion pour l'étude des flammes SEF laminaires.

Au terme de chaque essai, un flux continu d'azote est injecté dans la cellule pour éjecter la vapeur d'eau et les autres produits de combustion. Cette étape de balayage/nettoyage permet de contenir l'élévation de température de la cellule lorsque plusieurs essais sont réalisés successivement.

6.1.2 Méthode de préparation du mélange combustible

Pour obtenir le prémélange combustible souhaité, les gaz sont continuellement injectés dans la cellule. Le débit de chaque gaz est contrôlé à l'aide de débitmètres massiques thermiques (TMFC) dédiés *Bronkhorst*, série EL-FLOW, fonctionnant sur le même principe que ceux employés au laboratoire PRISME et présentés au chapitre 5. La régulation est effectuée par PID et l'incertitude constructeur est

$$\Delta Q = (0.5\% \text{ débit mesuré} + 0.2\% \text{ de la pleine échelle}). \quad (6.1)$$

Avant chaque série de mesure, le fonctionnement des débitmètres est vérifié pour éviter tout biais systématiques, à l'aide de deux systèmes de calibration basés sur des principes physiques différents. Le premier utilise des débitmètres CORIOLIS capables de déterminer directement le débit massique. Il s'agit d'un *Bronkhorst* mini CORI-FLOW ou d'un *Emerson* CMFS010, sélectionné en fonction de la plage et du débit maximum à estimer. Le second détermine le débit volumique avec le Definer 220 de *BIOS*. La précision des débitmètres est alors vérifiée en appliquant la loi des gaz parfaits pour comparer le débit massique au volume volumique.

L'air employé pour les mélanges carburant/air est un air atmosphérique comprimé dans une bouteille, format B50, à l'aide d'un compresseur haute pression présent au laboratoire CORIA. Pour assurer la répétabilité des mesures, chaque série de mesures est réalisée avec une même bouteille..

Pour les carburants liquides, deux bancs d'évaporation sont présents, comme illustré sur la figure 6.2. Chacun est équipé d'un système de contrôle de l'évaporation et du mélange, CEM *Bronkhorst*, sur lequel est branché un débitmètre massique thermique pour réguler la quantité de gaz vecteur et un régulateur massique de débit liquide pour réguler la quantité de carburant. L'injection des mélanges gazeux issus de ces bancs dans la cellule est effectuée par des lignes chauffées pour éviter toute condensation.

Pour obtenir un mélange homogène, tous les gaz sont mélangés dans un réservoir de prémélange placé en amont de l'injection dans la chambre. Ce dernier est également chauffé pour éviter tout phénomène de condensation à l'intérieur. De plus, pour assurer une répartition homogène du mélange dans la cellule, il est injecté par un seul point, placé au bas de la cellule, alors que deux points d'extraction sont présents, un en bas à côté du point d'injection et un sur le côté. Cette configuration entrée/sorties permet de créer un écoulement turbulent dans la cellule pour empêcher la formation de zone sans circulation et entretenir l'homogénéité du mélange.

Au final, les débitmètres massique sont utilisés sur ce dispositif comme régulateur de débit. L'incertitude constructeur peut être utilisée pour estimer l'incertitude sur la richesse des mélanges combustibles composés de n gaz, par l'équation quadratique [166] :

$$\frac{\Delta\phi}{\phi} = \sqrt{\sum_n \left(\frac{\Delta Q_i}{Q_i}\right)^2}. \quad (6.2)$$

L'incertitude absolue maximale théorique avec ce dispositif sur la richesse a été évaluée pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ composé de quatre différents gaz à $\varepsilon_{max} = \pm 0.02$.

6.2 Diagnostic optique : la tomographie laser

La technique de tomographie laser haute cadence est utilisée dans le but d'étudier la propagation du front de flamme et de pouvoir déterminer la vitesse des gaz frais en amont de celui-ci à l'aide d'une méthode de post-traitement de type vélocimétrie par image de particule (PIV) développée au sein du laboratoire CORIA et publiée dans [70].

6.2.1 Présentation

La tomographie laser est un diagnostic optique 2D reposant sur le régime de diffusion de Mie d'un traceur présent dans le milieu d'étude. La diffusion de Mie est un phénomène de collision élastique entre des particules de taille équivalente ou supérieure à la longueur d'onde du rayonnement incident qui le génère. La lumière diffusée par ces particules est donc de la même longueur d'onde que le rayonnement incident.

Sur ce dispositif, le rayonnement incident provient d'un laser double tête Nd :YLF Darwin Dual *Quantronix*, délivrant à une fréquence de 5 kHz une impulsion de 6 mJ à une longueur d'onde de $\lambda = 527 \text{ nm}$. Il est utilisé pour créer une nappe laser en combinant une lentille cylindrique de distance focale $f = -13 \text{ mm}$ et une lentille sphérique de distance focale $f = 254 \text{ mm}$ et éclairer avec un plan 2D le milieu d'étude. Ce dispositif est représenté sur la figure 6.3. Par ailleurs, afin d'obtenir une répartition spatiale de l'énergie suffisante sur toute la nappe laser,

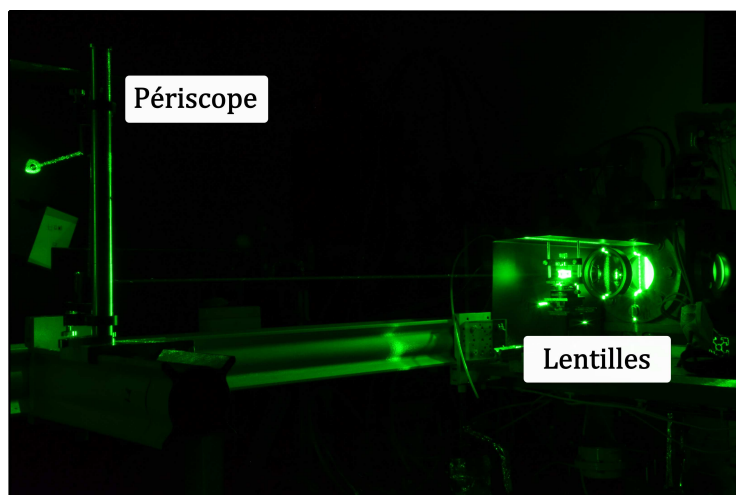


FIGURE 6.3 – Vue d'ensemble du dispositif optique pour générer une nappe laser.

les deux têtes sont superposées temporellement.

Les traceurs utilisés pour ce diagnostic sont des gouttes d'huile de silicone *Rhodorsil* 550. A l'aide de l'ensemenceur utilisé, elles ont une taille micrométrique allant de 1 à $3\mu m$ [167]. Leurs propriétés seront présentées en détail dans la section suivante. Elles s'évaporent dans le front de flamme au passage de celui-ci et permettent ainsi d'identifier un rayon de flamme à l'interface entre un milieu éclairé où les particules traceurs diffusent la lumière et un milieu sombre où elles se sont évaporées.

Les images de tomographie laser sont enregistrées à l'aide d'une caméra rapide *Photron* Fastcam SA1.1, placée à 90° par rapport au plan défini par la nappe laser. Elle est synchronisée par rapport à la commande d'allumage avec le laser à la fréquence d'acquisition de $5\,000\text{ im/s}$. Sa résolution spatiale est de $1024 \times 1024\text{ pixels}^2$ sur 8 bits. Elle est équipée d'un objectif *macro-Nikkor* d'une focale de $f = 105\text{ mm}$ et d'une ouverture de $f/2.5$ focalisée sur un champ de vision de $50 \times 50\text{ mm}^2$. Un filtre interférentiel passe bande à $527 \pm 10\text{ nm}$ est placé devant l'objectif pour supprimer la chemiluminescence de la flamme. Au final, le grandissement de ce dispositif est de 0.049 mm/pixel . La figure 6.4 suivie de l'animation 6.5 présente les images enregistrées par ce dispositif de la propagation d'une flamme laminaire sphérique stoechiométrique de CH_4/air aux conditions thermodynamiques atmosphériques, $P = 1\text{ atm}$ et $T = 298\text{ K}$.

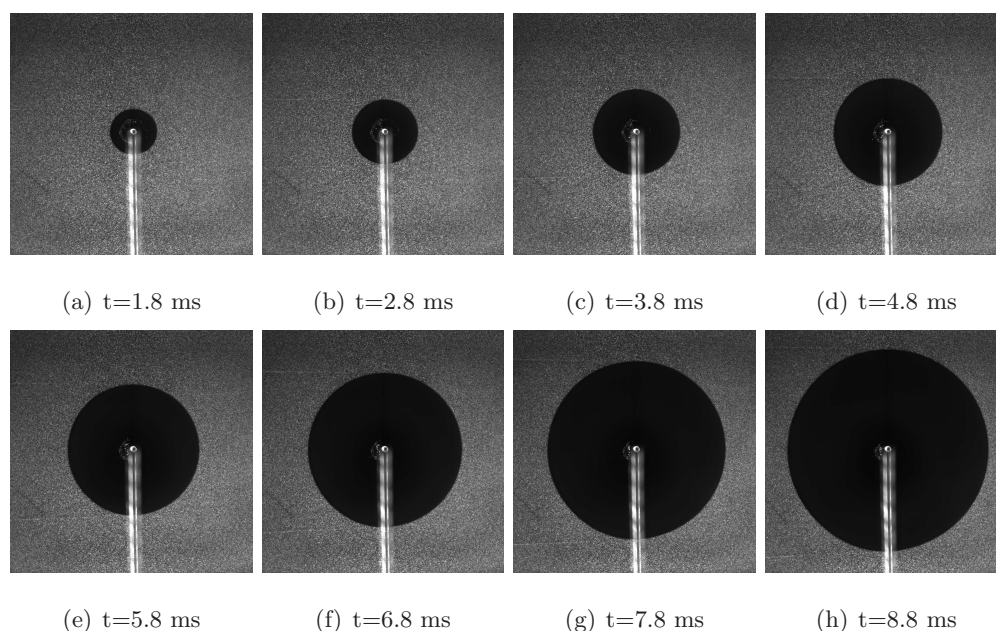


FIGURE 6.4 – Visualisation de la propagation d'une flamme stoechiométrique CH_4/air à $P = 1\text{ atm}$ et $T = 298\text{ K}$, enregistrée par la technique de tomographie laser.

FIGURE 6.5 – Animation de la propagation d’une flamme stoechiométrique CH_4/air à $P = 1 atm$ et $T = 298 K$, enregistrée par la technique de tomographie laser. *En version pdf, appuyez sur \triangleright pour lancer l’animation.*

6.2.2 L'ensemencement

Le traceur utilisé pour la tomographie laser dans cette étude est l'huile de silicone *Rhodorsil* 550. Elle a été sélectionnée pour l'étude de la combustion de flammes prémélangées car c'est une huile minérale inerte chimiquement, i.e. qu'elle n'agit pas comme un carburant supplémentaire au mélange comme pourrait le faire une huile végétale telle que l'huile d'olive. De plus, elle présente une température d'ébullition suffisamment élevée pour que des gouttes existent dans la zone de préchauffage du front de flamme. Ce qui permet de pouvoir identifier clairement la vitesse maximale des gaz frais à l'entrée du front de flamme u_g , comme illustré sur la figure 6.6, extraite de [69].

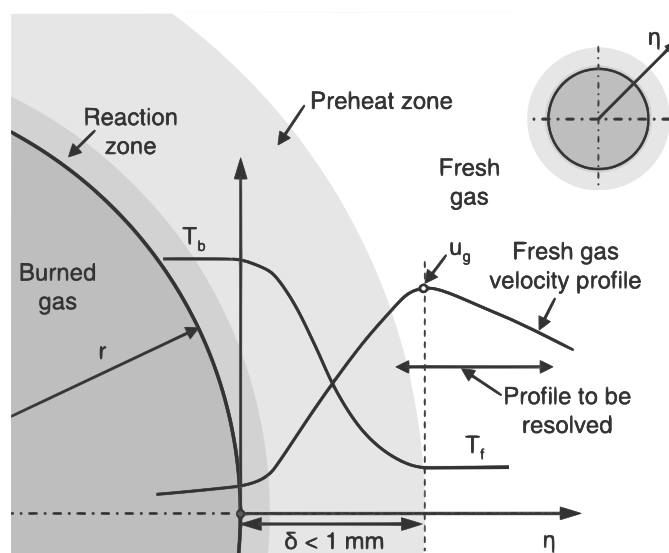


FIGURE 6.6 – Schéma du profil de vitesse de gaz frais devant le front de flamme et dans la zone de préchauffage, extrait de [69].

Ses spécifications sont présentées dans le tableau 6.1.

Elle permet de générer des gouttes micrométriques à l'aide d'un ensemencement de type bulleur. Le gaz inerte dont la fraction molaire est la plus importante dans le mélange est utilisé pour passer dans l'ensemencement et entraîner ces gouttes. Le débit de ce gaz est séparé en deux en amont de l'ensemencement, comme illustré sur le schéma 6.2, pour sélectionner le flux de gaz à y faire passer et obtenir un nuage de goutte homogène et maîtriser sa densité. Néanmoins, l'introduction de particules dans le mélange d'étude peut provoquer des effets indésirables, tels que ces particules peuvent agir comme :

- un ballast thermique qui ralentit la propagation du front de flamme,

Propriétés de l'huile de silicone <i>Rhodorsil</i> 550	
Température d'ébullition	568.0 K
Masse molaire	0.37275 kg/mol
Densité	1065 kg/m ³
Capacité thermique massique	1418.0 J/kg/K
Enthalpie	1.04e5 J/kg

TABLE 6.1 – Propriétés de l'huile de silicone *Rhodorsil* 550, implémentées dans le code YALES2 pour des simulations 1D d'évaporation de goutte au passage d'un front de flamme.

- une espèce capable d'absorber l'énergie thermique dégagée par les gaz brûlés chaud et ainsi modifier les conditions thermodynamiques dans les gaz frais. Cette aspect peut notamment provoquer une mauvaise analyse des résultats pour les études intéressées à l'influence des transferts radiatifs d'énergie thermique.

C'est pourquoi plusieurs tests ont été réalisés sur cette huile pour attester de son inaction sur la propagation du front de flamme et les transferts radiatifs d'énergie thermique.

1. Pour permettre l'étude sur des mélanges au fort pouvoir radiatif, comme les mélanges utilisant les systèmes de recirculation EGR, des carburants issus de la gazéification de la biomasse, etc, le pouvoir d'absorption d'un rayonnement thermique de cette huile a été étudié. Son spectre d'absorption a été mesuré à l'aide d'un spectroscope *SPECTRUM* BX FT-IR équipé d'un atténuateur de réflectance totale¹. Cet appareil permet d'effectuer des mesures de spectre dans le domaine des longueurs d'onde infrarouges, caractéristiques des fréquences mises en jeu dans les phénomènes radiatifs de transfert d'énergie thermique. Il est superposé sur la figure 6.7 au spectre d'émission simulé des gaz brûlés d'une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à richesse $\phi = 0.8$, $P = 1 \text{ atm}$ et $T = 298 \text{ K}$ ². Cette figure montre qu'il n'y pas de superposition du spectre d'absorption de l'huile *Rhodorsil* 550 avec celui de l'émission des gaz brûlés. Les espèces majoritaires des gaz brûlés sont bien représentées avec des pics d'émissions pour les longueurs d'onde comprises entre 1800 cm^{-1} et 2450 cm^{-1} et entre 3100 cm^{-1} et 4100 cm^{-1} correspondant aux bandes vibra-rotationnelles des espèces CO , CO_2 et H_2O . Alors que l'absorption de l'huile de

1. Les mesures ont été réalisés au laboratoire MRIE de l'INSA de Rouen avec l'aide de Mr S. Marcotte.

2. La simulation de ce spectre d'émission a été réalisée avec l'aide de Mr P. Perez sur le code radiatif de l'ONERA avec une résolution spectrale de 5 cm^{-1} .

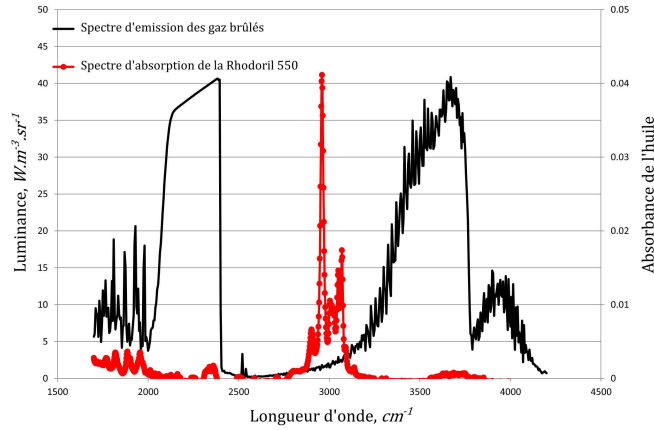


FIGURE 6.7 – Superposition du spectre d’absorption de l’huile de silicone *Rhodorsil* 550 et d’un spectre d’émission simulé des gaz brûlés d’une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$, $P = 0.1 MPa$ et $T = 298 K$.

silicone présente un pic autour de 3000 cm^{-1} . Ainsi, l’étude des transferts radiatifs entre gaz brûlés et gaz frais sur des espèces au fort pouvoir radiatif contenues dans les deux milieux n’est pas influencée par les gouttes. La présence de l’huile de silicone est donc inerte du point de vue des échanges radiatifs.

2. Dans un second temps, une étude a été menée sur l’influence de la présence de particules comme ballast thermique sur la propagation du front de flamme. En effet, la quantité d’énergie nécessaire pour évaporer les gouttes peut ne pas être négligeable devant l’énergie totale dégagée par la flamme et ralentir sa propagation. Pour cela, la vitesse de propagation du front de flamme $S_f = \frac{dR}{dt}$ a été déterminée sur le dispositif présent au laboratoire PRISME (Chap. 5) avec et sans présence de gouttes d’huile dans les gaz frais. Les résultats extrapolés à étirement nul de cette vitesse par l’équation non linéaire 3.34 sur une flamme de $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à $T = 298 K$ pour trois richesses distinctes, d’un mélange pauvre à un mélange riche, et deux pressions initiales, $P = 1 \text{ atm}$ et $P = 3 \text{ bar}$, sont présentés dans la figure 6.8. Ils démontrent que la présence des particules d’huile dans le mélange initial n’introduit aucune différence sur la propagation du front de flamme. De plus, *Varea* a démontré au cours de ses travaux de thèse [165] que la densité du nuage de particules, exprimé en terme d’intensité de la lumière réfléchiée par les gouttes qui est directement reliée à la quantité de gouttes présentes, n’a pas d’influence notable sur la propagation du front de flamme lorsque l’on s’intéresse uniquement à des résultats de

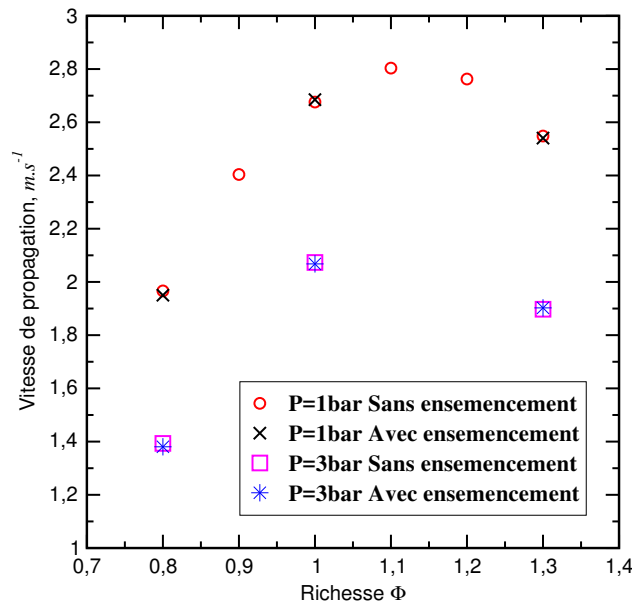


FIGURE 6.8 – Vitesse de propagation d’une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ en fonction de la richesse avec et sans présence d’ensemencement pour deux pressions initiales distinctes.

tomographie laser.

Au final, ces études ont démontré que l’introduction dans un mélange combustible de gouttes d’huile de silicone *Rhodorsil* 550, nécessaire à la mise en place du diagnostic optique de tomographie laser, n’influence ni sa propagation ni les propriétés thermodynamiques et radiatives des gaz frais.

6.2.3 Identification du rayon de flamme

Pour détecter le contour de flamme et définir son rayon, un logiciel de post-traitement des images de tomographie laser a été développé. Il utilise les fonctions de la base *OpenCV* et son fonctionnement, image par image, est le suivant. Premièrement, l’image de tomographie laser enregistrée par la caméra est binarisée avec un seuil sélectionné par l’utilisateur et crée une image dite ‘mask’. Ce ‘mask’ est ensuite utilisé pour définir le contour brute du front de flamme à partir d’un algorithme basé sur la méthode de *Suzuki & Abe* [168]. Afin de réduire le bruit de détection dû à la pixelisation de l’image et aux effets des particules, le contour est converti en un signal dans l’espace de Fourier à l’aide d’une transformée de Fourier *FFT*. Il est filtré par un filtre passe-bas dont la fréquence de coupure peut être sélectionnée par l’utilisateur. Le

contour, utilisé pour extraire le rayon de flamme, est alors reconstruit par transformée inverse FFT^{-1} du signal filtré. Il est représenté en rouge sur la figure 6.9 qui schématise la détection du contour. Enfin pour définir le rayon de flamme, chaque point (x,y) du contour filtré est interpolé par une méthode des moindres carrées développée par *Razet et al.* [169] pour définir le centre de la flamme sphérique et son rayon R_f .

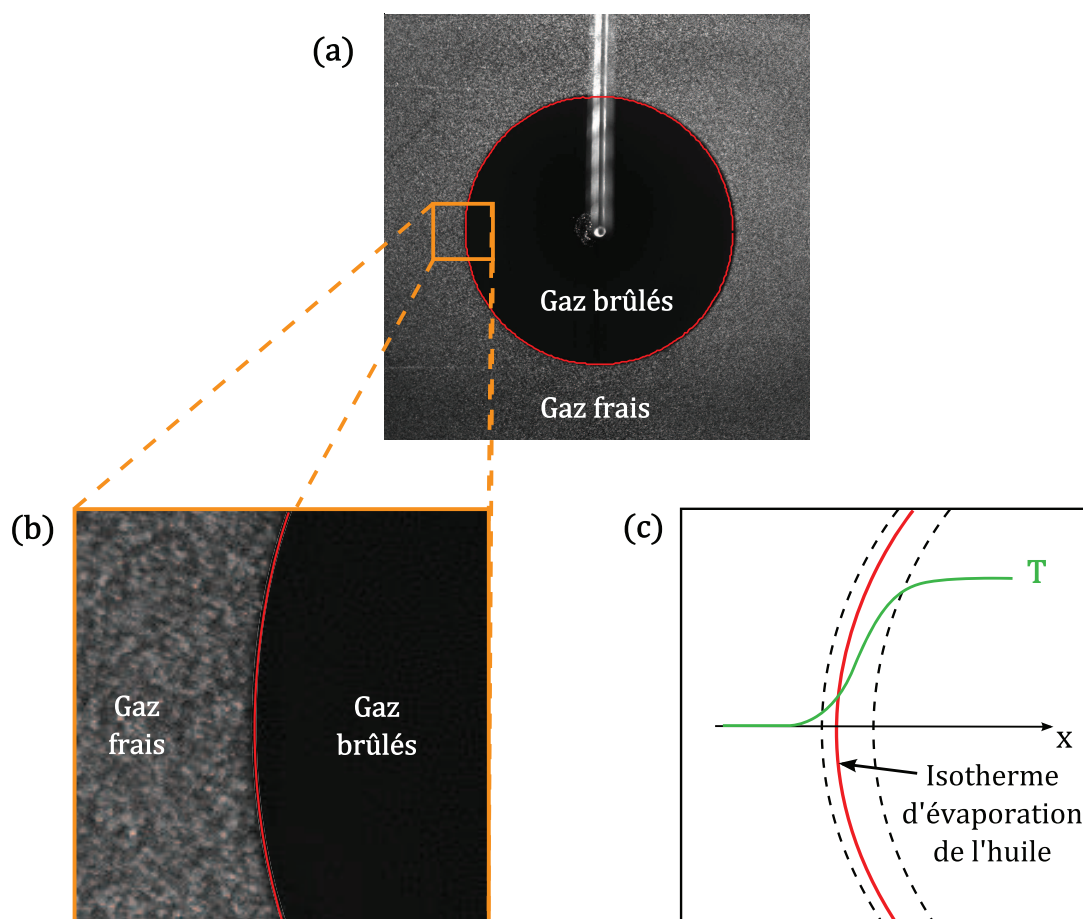


FIGURE 6.9 – Schéma de détection du rayon de flamme par la technique de tomographie laser.

Au final, ce contour correspond à l'iso-surface séparant la zone où toutes les gouttes sont évaporées et celles où des gouttes sont encore présentes, proche de l'isotherme d'évaporation des gouttes dans les conditions expérimentales. Le rayon de flamme extrait par cette technique est alors dépendant de l'isotherme d'évaporation totale des gouttes d'huiles. Il est alors fonction de l'isotherme d'évaporation des plus grosses gouttes de l'ensemencement.

Pour estimer avec plus de précision l'iso-surface correspondant au rayon de flamme extrait par la méthode de tomographie laser, une étude numérique sur l'isotherme d'évaporation totale des gouttes d'huile de *Rhodorsil 550* en fonction de leur diamètre initial a été réalisée. Ces simulations

ont été produites avec le code *YALES 2* dans une configuration de flamme 1D plane, comme présenté dans la section 4.3.2.4. Les résultats de ces simulations pour des tailles de gouttes allant de $1.5 \mu\text{m}$ à $6.0 \mu\text{m}$ sont représentés sur la figure 6.10. Elle montre que l'évaporation totale des

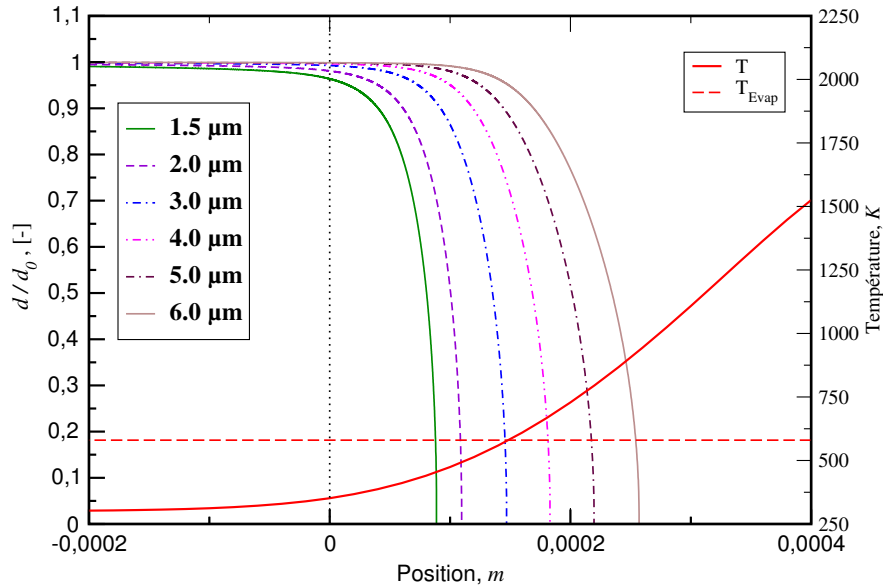


FIGURE 6.10 – Evaluation de l'isotherme d'évaporation des gouttes de *Rhodorsil* 550 et de sa position dans le front de flamme en fonction de leur diamètre initial. La position $x = 0$ représente l'iso-surface d'entrée dans le front de flamme.

gouttes est fonction de leur diamètre initial tel que :

- les gouttes peuvent s'évaporer avant la température d'ébullition théorique si leur diamètre est inférieur à $3.0 \mu\text{m}$,
- les gouttes à $3.0 \mu\text{m}$ s'évaporent totalement à l'isotherme $T = 580 \text{ K}$ très proche de la température d'ébullition,
- les gouttes à $4.0 \mu\text{m}$ s'évaporent totalement à 680 K ,
- les gouttes de tailles supérieures s'évaporent encore plus loin dans le front de flamme, cependant ces grands diamètres ne sont pas représentatifs de la taille réelle des gouttes produites par ce dispositif.

Ces résultats numériques permettent de pouvoir considérer dans cette configuration que l'iso-surface détectée par la technique de tomographie laser et assimilée au rayon de flamme est très proche de l'isotherme d'évaporation de l'huile de silicone employée, située autour de 570 K . De

plus, au vue du profil de température superposé sur la figure 6.10, l'intervalle de température ([459 680 K]) défini par une taille de gouttes réaliste allant de $1.5 \mu m$ à $3.0 \mu m$ correspond à un intervalle spatiale de $90 \mu m$. Soit moins de 2 *pixel* d'après le grandissement du dispositif optique, qui correspond alors à l'ordre de grandeur de l'incertitude de mesure caméra.

6.2.4 Détermination du profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme

La détermination du profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme est effectuée par un logiciel créé au sein du laboratoire CORIA. Il a été développé au cours des travaux de thèse de *Varea* [165] et a fait l'objet d'une publication [70]. Son fonctionnement est présenté ici et il faut se référer à [165] pour sa validation.

Le profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme est résolu à partir d'un algorithme de post-traitement de type PIV, traitant les images de tomographie laser par paire, en prenant en compte la topologie locale de la flamme. Une région d'intérêt (ROI) est créée à partir du contour de flamme filtré sur chacune des images. Ces régions sont définies par un angle imposé par l'utilisateur, pouvant atteindre 360° , et une hauteur fixée à 100 pixels. Elles sont ensuite retranscrites en coordonnées cartésiennes à l'aide d'un schéma d'interpolation bilinéaire. Une fenêtre d'interrogation, d'une taille de 3 pixels, est fixée à la position, noté Δr_j , sur la ROI de la première image $i1$ et une méthode de corrélation croisée 2D est utilisée pour déterminer son déplacement sur la seconde image $i2$. Pour accéder à une précision sub-pixel, un filtre gaussien est ajusté au pic de corrélation et permet la définition du déplacement optimal, noté Δr_k^{opti} . La vitesse des gaz frais au point j s'exprime alors par l'équation

$$w^j = \frac{r_{i2} - r_{i1}}{\Delta t} + \frac{\Delta r_k^{opti} - \Delta r_j}{\Delta t} = S_f + \frac{\Delta r_k^{opti} - \Delta r_j}{\Delta t}. \quad (6.3)$$

La fenêtre d'interrogation est ensuite déplacée pixel par pixel sur l'image $i1$ en répétant l'opération précédente à chaque fois pour reconstruire le profil de vitesse de gaz frais devant le front de flamme. L'exactitude des résultats est alors dépendant de la résolution spatiale qui conditionne le déplacement pixel à pixel et le nombre de points pour définir le profil de vitesse dans une zone très mince. La figure 6.11 présente un profil de vitesse des gaz frais mesuré expérimentalement et superposé au même profil numérique, issus d'une simulation 3D effectuée par *YALES2* (Y2) reproduisant à l'identique l'expérience. Les profils de température et de fraction massique de CH_4 sont aussi représentés pour positionner l'entrée dans le front de flamme.

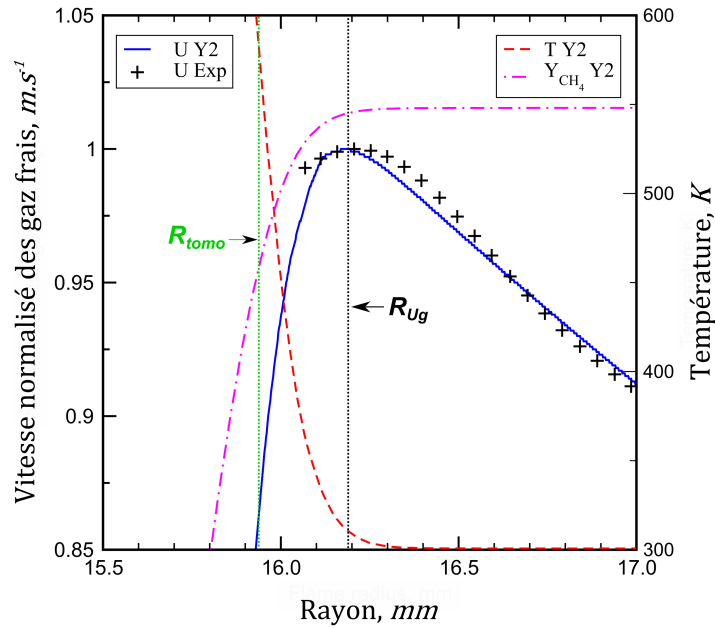


FIGURE 6.11 – Illustration de la résolution spatiale du profil de vitesse des gaz frais mesuré expérimentalement et comparé à un profil numérique issu d’une simulation 3D effectuée par *YALES2* (Y2) reproduisant à l’identique l’expérience.

Cette figure démontre que les particules d’ensemencement permettent la mesure de la vitesse maximale. De plus, la position de cette vitesse coïncide bien avec l’entrée dans le front flamme par comparaison avec les profils de température et de fraction massique de carburant. La décroissance de la vitesse à l’entrée du front de flamme est bien observée. Elle est due au changement de température et de densité dans le front de flamme [99]. Pour que l’extraction de la vitesse maximale soit valide, il est donc important que les gouttes ne s’évaporent pas devant mais dans le front de flamme pour permettre l’observation d’un plateau sur le profil de vitesse. Au final, la vitesse d’entrée des gaz frais dans le front de flamme, u_g , est définie comme la valeur maximale du polynôme d’ordre 10 ajusté au mieux au profil de vitesse brut mesuré. Ainsi, ce dispositif expérimental permet de mesurer directement la vitesse caractéristique $\tilde{S}_{d,u}$.

Par ailleurs, on peut noter sur cette figure que la position du rayon de flamme ne coïncide pas avec la fin du profil de vitesse mesuré des gaz frais car l’extraction de ce profil n’est réalisé qu’à partir de 3 pixel (taille d’une fenêtre d’interrogation) devant le contour de flamme filtré, assimilé au rayon de flamme.

L’animation 6.12, extraite de [165], illustre ce post-traitement successif de construction du

profil de vitesse des gaz frais à partir d'un couple d'images de tomographie laser.

FIGURE 6.12 – Animation présentant l'extraction du profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme à partir des images de tomographie laser, extraite de [165]. *En version pdf, appuyez sur ▷ pour lancer l'animation.*

La comparaison entre la figure de principe 6.6, la figure 6.11 représentant la résolution spatiale du profil de vitesse déterminé expérimentalement et l'animation 6.12 réalisée à partir de résultats expérimentaux montre que le maximum de vitesse correspondant à l'entrée des gaz frais dans le front de flamme est bien identifiable expérimentalement sur l'ensemble des images de tomographie enregistrées tout au long de la propagation du front de flamme dans la zone observée de $50 \times 50 \text{ mm}^2$.

Enfin, il faut noter que le couple d'images traitées n'est pas forcément composé par des images successives. L'utilisateur peut sélectionner de un à trois intervalles de temps d'acquisition entre les images corrélées. Le choix est réalisé en fonction du déplacement de la flamme qui doit être

suffisamment élevé pour que le pic de corrélation soit clairement identifiable Et augmenter la précision de la mesure de la vitesse $S_{d,u}$.

6.3 Conclusion

Au final, le dispositif expérimental présent au laboratoire CORIA permet l'étude des flammes de prémélange dans une enceinte à volume constant. Il permet de mesurer la vitesse de combustion laminaire définie par $\tilde{S}_{d,u}$, Eq. 3.45, en plus de la définition classiquement résolue expérimentalement sur les flammes SEF $\tilde{S}_{d,b}$, Eq. 3.46 grâce à la mesure direct de la vitesse d'entrée des gaz frais dans le front de flamme u_g . Basé sur le diagnostic optique de tomographie laser, il est à notre connaissance le seul dispositif dédié à l'étude des flammes de prémélange qui permet la mesure directe de $\tilde{S}_{d,u}$. De plus de nombreux tests et études, supplémentaires à ceux présentés dans [165], ont été effectués sur ce dispositif, son diagnostic et son post-traitement pour attester de la validité de ces mesures.

Chapitre 7

Etude sur la précision de mesure des dispositifs expérimentaux

Ce chapitre présente l'étude réalisée sur la fiabilité des mesures effectuées sur les deux dispositifs expérimentaux présentés précédemment. L'ensemble des paramètres pouvant être sources d'incertitudes, sur la préparation, la mesure et le post-traitement, ont été étudiés avec précision. Ces travaux ont été conduits durant une collaboration franco-allemande (nommée CPII dans la suite) entre quatre laboratoires : le CORIA UMR-6614, Rouen ; PRISME UPRES-4229, Orléans ; ICARE UPR-3021, Orléans et ITV, RWTH Aachen, Allemagne. Cette collaboration a permis une confrontation direct entre différents dispositifs expérimentaux. Les résultats et analyses de ces travaux sont ic présentés en détail. A noter qu'ils ont été communiqués dans [76, 170] et au cours du workshop international *LBV* [9] organisé au laboratoire CORIA en 2015.

Sommaire

7.1	Les facteurs d'incertitudes	136
7.2	Les installations expérimentales de la collaboration CPII	137
7.3	Précision de la préparation du mélange	139
7.4	La répétabilité tir à tir	141
7.5	Confrontation avec d'autres dispositifs expérimentaux	145
7.6	Conclusion	148

7.1 Les facteurs d'incertitudes

La figure 7.1 présente en fonction de la richesse la vitesse de combustion laminaire S_l^0 pour un mélange CH_4/air aux conditions atmosphériques mesurées par chacune des équipes qui composent la collaboration CPII dans la même configuration de flamme SEF. Des résultats de la littérature sont aussi présentés : ceux de l'USC (University of Southern California) sur une configuration de flamme à contre courant [67] et de la TUE (Technische Universiteit Eindhoven) sur une configuration de flamme plate "adiabatique" stabilisée [171]. Enfin, les vitesses calculées par simulations numériques avec le schéma cinétique *GRI-mech 3.0* [19] sont superposées à ces résultats expérimentaux. Cette figure présente, pour un carburant et des conditions thermodyna-

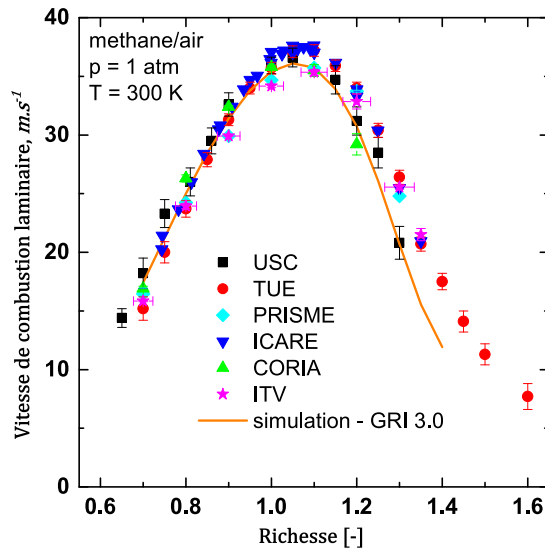


FIGURE 7.1 – Superposition des vitesses de combustion laminaire en fonction de la richesse, mesurées en 2013 sur un mélange CH_4/air aux conditions atmosphériques par les différentes équipes composant la collaboration CPII.

miques simples, des différences entre les valeurs mesurées de S_l^0 à partir de différents dispositifs expérimentaux en fonction de la richesse. Ces différences sont même supérieures aux incertitudes de mesure pour les mélanges riches ($\phi > 1.1$). De plus, pour ces mélanges riches, une divergence avec les simulations numériques s'observe pour la plupart des dispositifs expérimentaux.

D'un point de vue purement expérimental, les sources d'incertitudes sont nombreuses. Dans une publication récente, *Z. Chen* [7] a passé en revue ces différentes sources d'incertitudes et analysé leurs effets à l'aide de simulations numériques 1D sphériques (cf code *A-SURF* Chap. 4). Les facteurs influant la détermination de la LBV sur les flammes SEF en enceinte fermée à volume

constant sont :

- l'allumage,
- le confinement,
- les instabilités de combustion,
- la préparation du mélange,
- l'extraction du contour de flamme lors du post-traitement,
- les transferts d'énergie thermique radiatifs,
- l'extrapolation à étirement nul des mesures.

L'étude sur l'extrapolation à étirement nul de mesures expérimentales et les effets des transferts d'énergie thermique radiatifs ne seront pas traités ici mais font l'objet d'études complètes, présentées plus tard dans le chapitre 9.

Dans les chapitres précédents, il a été mis en évidence que les quatre premiers effets de cette liste sont négligeables, pour des flammes dont la vitesse de combustion est supérieure à 15 cm.s^{-1} [58], en limitant le post-traitement à un intervalle de rayons spécifiques liés au dispositif. Le rayon initial de cet intervalle est fonction de l'énergie initialement apportée au système. Elle est donc minimisée sur chaque essai et la zone de flamme où la mémoire de l'allumage est présente, estimée à $R < 0.6 \text{ cm}$ dans [7], n'est pas traitée. Pour tous les résultats présentés par la suite, le rayon minimal a été fixé à $R_{min} = 1 \text{ cm}$ pour les deux dispositifs. Le rayon maximal est quant à lui fonction du rayon interne de la chambre R_0 , tel que $R_{max} < \frac{1}{3}R_0$, ou des instabilités de combustion hydrodynamique, fonction du Le_{eff} du mélange, suivant leur ordre d'apparition. Ainsi, en respectant les recommandations qui ont été exposées, seule reste à quantifier l'incertitude sur la préparation du mélange, sa richesse, sa dérive entre différents essais pour les mêmes conditions thermodynamiques, ainsi que la précision de la méthode d'extraction du contour de flamme et l'estimation à partir de ce contour du rayon de flamme.

7.2 Les installations expérimentales de la collaboration CPII

Quatre dispositifs présents dans les quatre laboratoires qui compose la collaboration CPII et dédiés à l'observation de front de flamme SEF ont été utilisés. Ils utilisent des techniques différentes, que ce soit pour générer les mélanges combustibles et remplir la cellule ou le diagnostic optique utilisé pour définir un rayon de flamme sur une iso-surface particulière présente dans le front de flamme. Les caractéristiques principales de ces cellules de mesures sont répertoriées

dans le tableau 7.1.

	PRISME	CORIA	ICARE	ITV
Rayons interne, mm	100	82.5	238	50
Géométrie interne	Parfaitement sphérique	Equivalent sphérique	Parfaitement sphérique	Equivalent sphérique
T_{max} , K	473	573	523	
P_{max} , bar	10	20	50	30
Système d'allumage	Décharge électrique haute tension entre deux électrodes			
Gestion du mélange	TMFC		Pression partielle avec capteur P	
Précision de la richesse	± 0.015	± 0.02	± 0.004	± 0.018
Nb accès optiques	4	3	4	2
Diagnostic optique	Ombroscopie	Tomographie	Strioscopie	
Résolution, mm/pxl	0.143	0.049	0.178	0.100
Fréquence d'acquisition, kHz	10	5	25	

TABLE 7.1 – Caractéristiques principales des dispositifs expérimentaux de plusieurs laboratoires européens, composant la collaboration CPII.

La figure 7.2 illustre le type d'images enregistrées par ces quatre dispositifs.

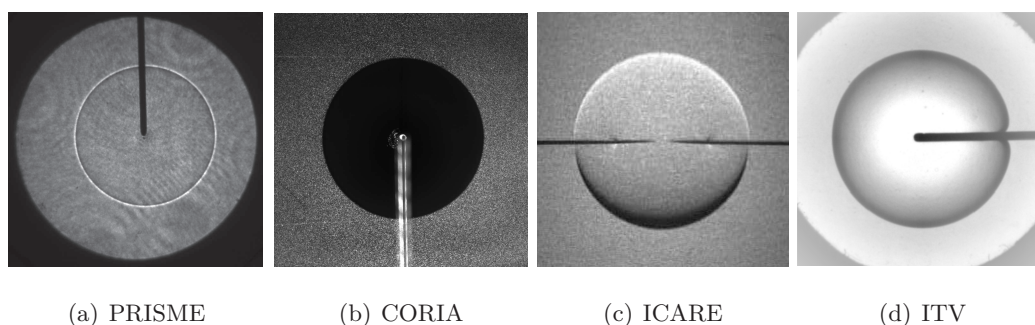


FIGURE 7.2 – Visualisation des images enregistrées par les dispositifs expérimentaux de différents laboratoires.

L'extraction du contour de flamme par la technique de strioscopie est équivalente à celle de la technique d'ombroscopie présentée dans le chapitre 5. Ainsi, deux techniques différentes peuvent être employées : une basée sur les gradients d'indice de réfraction et l'autre sur l'isotherme

d'évaporation de particules utilisées comme traceur.

Au final, il s'agit de quatre installations, qui diffèrent notamment par leur volume interne impactant l'intervalle de mesure influencées par le confinement et leur diagnostic optique impactant sur la détection du rayon de flamme. Notons que l'incertitude sur la richesse du mélange combustible reste comparable entre chaque dispositif d'après la valeur donnée par chaque laboratoire.

7.3 Précision de la préparation du mélange

Les valeurs d'incertitude de richesse données dans la tableau 7.1 sont des valeurs d'incertitude théorique, basée sur les incertitudes du matériel utilisé pour générer les mélanges combustibles. Les dispositifs expérimentaux aux laboratoires PRISME et CORIA utilisent tous deux pour contrôler les mélanges combustibles des débitmètres massiques thermiques (TMFC), basés sur la même technologie, mais avec des méthodes de remplissage de leur cellule différentes. Tandis que les laboratoire ICARE et ITV utilise des capteurs de pression pour connaître, à partir de la loi des gaz réels, la masse injectée de chaque composant du mélange. Pour tous ces dispositifs, l'incertitude théorique du matériel ne correspond pas nécessairement à l'incertitude réelle sur la richesse (i.e. la composition) du mélange. Dans l'objectif de quantifier avec précision cette erreur, des mesures par chromatographie en phase gazeuse (GC) ont été réalisées pour un mélange riche carburant/air afin de donner la valeur maximale de l'incertitude. En effet, avec le jeu des fractions molaires, c'est pour un mélange combustible/air riche que l'incertitude sur la richesse sera la plus forte. Le mélange sélectionné est un mélange CH_4/air à la richesse $\phi = 1.3$. Deux échantillons sont prélevés directement dans les cellules de mesure où le mélange est préparé avec la procédure de remplissage propre à chacun des dispositifs. Il sont analysés le jour même pour éviter toutes détériorations ou perturbations.

La figure 7.3 présente le dispositif présent au laboratoire ICARE et utilisé pour ces mesures. Il est composé d'un chromatographe en phase gazeuse (GC) *Hewlett Packard* HP6890 7.3(a) et d'un système d'injection des gaz adapté 7.3(b). Il est équipé d'une colonne de séparation de type PLOT (porous layer open tubular) *HP Molsieve 5A*, fonctionnant à une température de 50° . L'injecteur est lui aussi chauffé à une température de 50° . Le gaz vecteur utilisé est de l'hélium pur à 99.9999%. La concentration molaire cible correspondant à une richesse de 1.3 étant de 12.01%, la calibration du GC est réalisée pour des concentrations molaires comprises



(a) Vue du HP6890 GC

(b) Système d'injection de gaz vers le GC

FIGURE 7.3 – Vue du dispositif de chromatographie en phase gazeuse.

entre 5% et 14%. Il a été vérifié que le capteur présente une réponse parfaitement linéaire suivant la concentration en méthane, avec un coefficient de corrélation de $r^2 = 0.9999$ par régression linéaire de la calibration. L'incertitude sur la mesure de la richesse de ce mélange a été évaluée à $\pm 0.04\%$.

Le tableau 7.2 présente les résultats de la chromatographie en phase gazeuse des dispositifs des laboratoires CORIA et ITV, caractéristiques des deux techniques de régulation des mélanges. Chacun résulte de la moyenne des mesures effectués sur deux échantillons.

	Richesse cible	Concentration molaire mesurée	Richesse mesurée	Ecart mesuré
CORIA	1.3	$12.20 \pm 0.04\%$	1.323	1.7%
ITV		$11.90 \pm 0.04\%$	1.287	1%

TABLE 7.2 – Résultats de la chromatographie en phase gazeuse.

Au final, les mesures par chromatographie en phase gazeuse ont confirmé les valeurs maximales de l'incertitude en richesse répertoriées dans le tableau 7.1. Ainsi, les études présentées dans ce manuscrit, le dispositif du laboratoire CORIA présente une incertitude de ± 0.02 sur la richesse. Et elle est de ± 0.015 pour le dispositif du laboratoire PRISME. Les deux techniques de remplissage, utilisant les mêmes appareils de régulation du mélange, donnent accès à des précisions équivalentes sur la richesse du mélange. Elles ne posent donc aucun problème quant à la précision des mélanges réalisés. Le choix de la technique se voit alors seulement imposé en rapport au diagnostic optique employé, où dans un cas seul la précision du mélange compte (PRISME) et dans l'autre il faut une méthode de remplissage avec un flux continu pour pouvoir maîtriser l'ensemencement (CORIA).

Notons tout de même que cette incertitude n'a pas le même impact sur la mesure de la

vitesse de combustion laminaire en fonction de la richesse, quel que soit le dispositif expérimental employé. La figure 7.4 présente la courbe d'évolution en fonction de la richesse des vitesses $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$ pour un mélange C_2H_6/air aux conditions atmosphériques de température et de pression. Les mesures sur ce mélange ont été effectuées sur le dispositif du laboratoire CORIA. Les valeurs à étirement nul, présentées dans cette figure, ont été obtenues par extrapolation non-linéaire, (Eq. 3.48), des vitesses mesurées. Cette figure montre bien qu'autour de la stoechiométrie, la

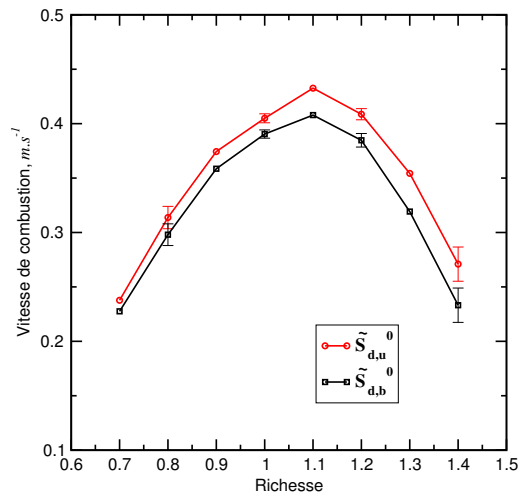


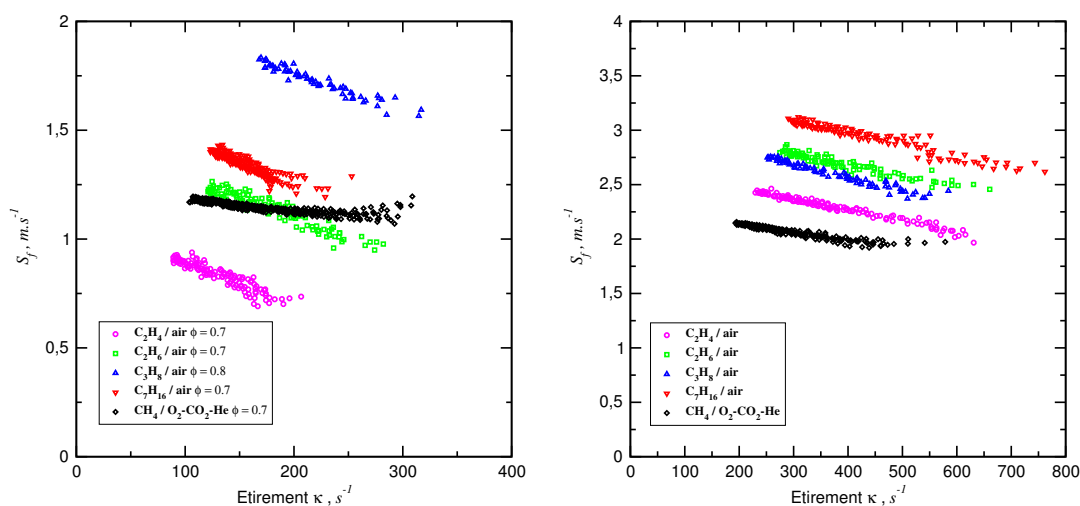
FIGURE 7.4 – Evolution en fonction de la richesse des vitesses $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$ pour un mélange C_2H_6/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

courbe représentant l'évolution de ces vitesses en fonction de la richesse présente un plateau, alors que son évolution est fortement marquée pour les mélange riches et pauvres. Dès lors, une erreur de 1.5% sur la richesse peut provoquer une erreur de 0.2% sur la vitesse extrapolée à étirement nul pour la richesse cible 1.1. Alors qu'elle peut atteindre 4.5% à la richesse cible 0.8.

7.4 La répétabilité tir à tir

Pour analyser des mesures expérimentales, il est nécessaire pour chaque mélange de réaliser plusieurs essais pour une même condition thermodynamique et de richesse afin d'augmenter le poids statistique des résultats. La section précédente vient d'évaluer la précision sur la préparation du mélange combustible. Mais lorsque plusieurs tirs sont réalisés, il est important d'estimer aussi la répétabilité tir à tir. Elle peut d'ailleurs permettre de mettre en évidence la présence d'une dérive sur la préparation du mélange. Pour cela, les figures 7.5 et 7.6 présentent pour

le dispositif du laboratoire CORIA, superposées chacune sur un même graphique, la vitesse de propagation absolue S_f et la vitesse d'entrée des gaz frais dans le front de flamme u_g mesurées pour quatre essais de différents mélanges carburant/air aux conditions thermodynamiques atmosphériques en fonction de la richesse.



(a) Mélanges pauvres

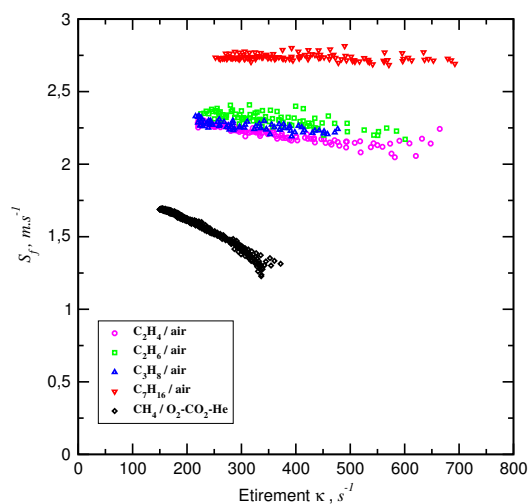
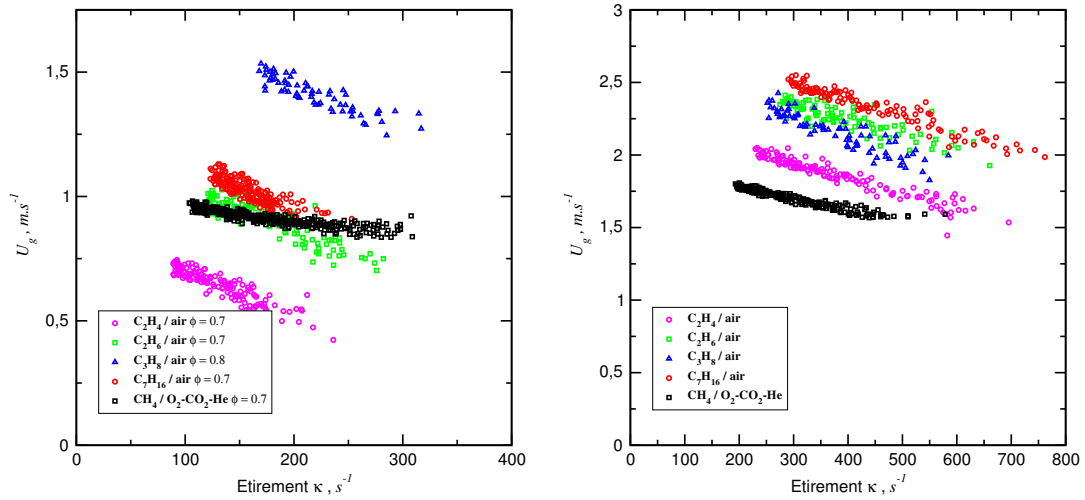
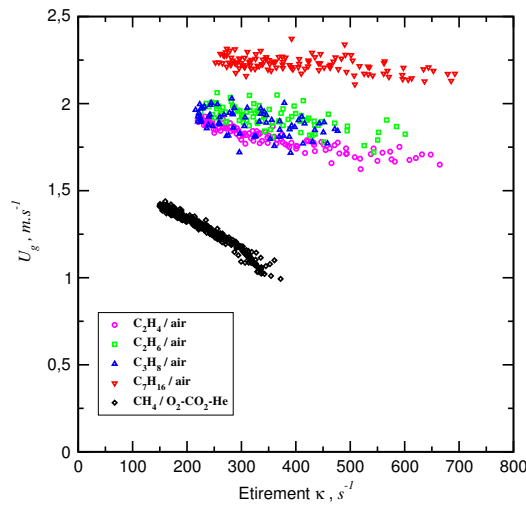
(b) $\phi = 1.0$ (c) $\phi = 1.3$

FIGURE 7.5 – Illustration pour le dispositif du laboratoire CORIA de la répétabilité de la mesure de la vitesse de propagation absolue S_f en superposant pour différents mélanges combustibles et richesses aux conditions thermodynamiques atmosphériques quatre essais.



(a) Mélanges pauvres

(b) $\phi = 1.0$



(c) $\phi = 1.3$

FIGURE 7.6 – Illustration pour le dispositif du laboratoire CORIA de la répétabilité de la mesure de la vitesse d’entrée des gaz frais dans le front de flamme u_g en superposant pour différents mélanges combustibles et riches aux conditions thermodynamiques atmosphériques quatre essais.

De même, la figure 7.7 présente pour un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ la superposition de quatre essais aux conditions thermodynamiques atmosphériques pour trois différentes richesses réalisés sur le dispositif du laboratoire PRISME. Parmi ces quatre essais, deux ont été réalisés sans présence de particules dans les gaz frais et les deux autres avec présence de gouttelettes

d'huile de *Rhodorsil 550* pour reproduire l'ensemencement nécessaire à la technique de tomographie. Cet ensemencement est réalisé, pour ces deux derniers, au maximum des capacités du dispositif pour mettre clairement en évidence un impact (ballast thermique, modification de la chimie..) dû à la présence et l'évaporation des gouttes. De plus, la densité du brouillard de gouttes est comparable à celle réalisée sur le dispositif du laboratoire CORIA.

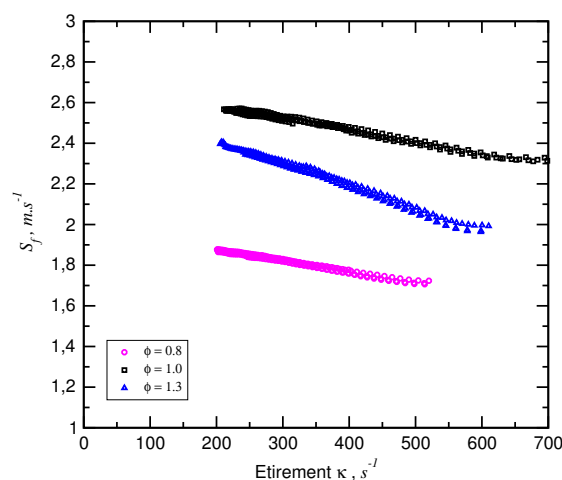


FIGURE 7.7 – Illustration de la répétabilité de la mesure de la vitesse de propagation absolue S_f en superposant pour différentes richesses d'un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ aux conditions thermodynamiques atmosphériques ($P = 1 atm$ et $T = 298 K$) quatre différents tirs avec et sans présence d'ensemencement dans les gaz frais sur le dispositif du laboratoire PRISME.

Ces trois figures démontrent qu'aucune différence n'est notable entre plusieurs essais pour les mêmes conditions thermodynamiques et de richesse des mélanges étudiés sur ces deux dispositifs expérimentaux. De plus, la figure 7.7 démontre une fois de plus que l'ensemencement n'a pas d'impact notable sur les mesures brutes extraites des expériences.

A ce stade, nous pouvons donc conclure que la répétabilité des mesures effectuées sur les deux dispositifs est très bonne. Ainsi, si un biais sur la préparation des mélanges est présent, il reste constant et ne dérive pas tout au long des différentes séries de mesures. Pour aller encore plus loin dans l'analyse de la présence d'un biais constant, les mesures des deux dispositifs sur un mélange CH_4/air à différentes richesses ont été superposées et comparées avec les mêmes mesures réalisées sur les dispositifs présents dans les différents laboratoires européens de la collaboration CPII. Ce résultat est présenté dans la section suivante.

7.5 Confrontation avec d'autres dispositifs expérimentaux

Cette section présente une partie des résultats réalisés au cours d'une étude collaborative franco-allemande (nommée ici : CPII) entre les laboratoires : CORIA UMR-6614, Rouen ; PRISME UPRES-4229, Orléans ; ICARE UPR-3021, Orléans et ITV, RWTH Aachen, Allemagne.

Les figures 7.8 et 7.9 présentent, respectivement en fonction du rayon de flamme R_f puis de l'étirement total du front de flamme κ , la vitesse de propagation absolue $S_f = \frac{dR_f}{dt}$ déterminée sur chacun des dispositifs. Sur chacune, on représente par deux traits pointillés la région d'intérêt contenue dans l'intervalle de rayon : $1 < R_f < 2 \text{ cm}$.

La comparaison entre les différents dispositifs faite sur ces figures démontre que les mesures de la vitesse de propagation absolue sont reproductibles quels que soient le dispositif expérimental et le diagnostic optique utilisé pour identifier le rayon de flamme. En effet, la différence pour chaque valeur de l'étirement entre les deux vitesses extrêmes mesurées est inférieure à 5% dans la gamme de rayon : $1 < R_f < 2 \text{ cm}$. Par ailleurs, ces résultats démontrent que la fréquence d'acquisition des images, différente selon les dispositifs, n'influence pas les résultats sur les gammes de vitesses observées [76].

Ainsi, pour un intervalle où tous les facteurs de perturbation sont négligeables sur tous ces dispositifs, les résultats extraits de chacun montrent une très bonne cohésion. La fiabilité des mesures effectuées sur les dispositifs des laboratoires PRISME et CORIA est alors confirmée, que ce soit sur la préparation des mélanges combustibles, l'extraction des données brutes et leur traitement.

Néanmoins, la figure 7.9 montre que la représentation de la vitesse de propagation en fonction de l'étirement du front de flamme forme un nuage de point dont la dispersion même faible peut être une forte source d'incertitude pour l'introduction de modèle à étirement nul et donc l'estimation de la vitesse de combustion laminaire S_l^0 , quel que soit le dispositif expérimental utilisé. De plus, cette dernière figure montre la complexité de l'allumage pour les mélanges riches (Fig. 7.9 (c).), dont l'impact peut intervenir jusqu'aux la limite de la zone d'intérêt. Le comportement fortement non linéaire de la vitesse pour ces mélanges est aussi clairement illustré sur cette même figure.

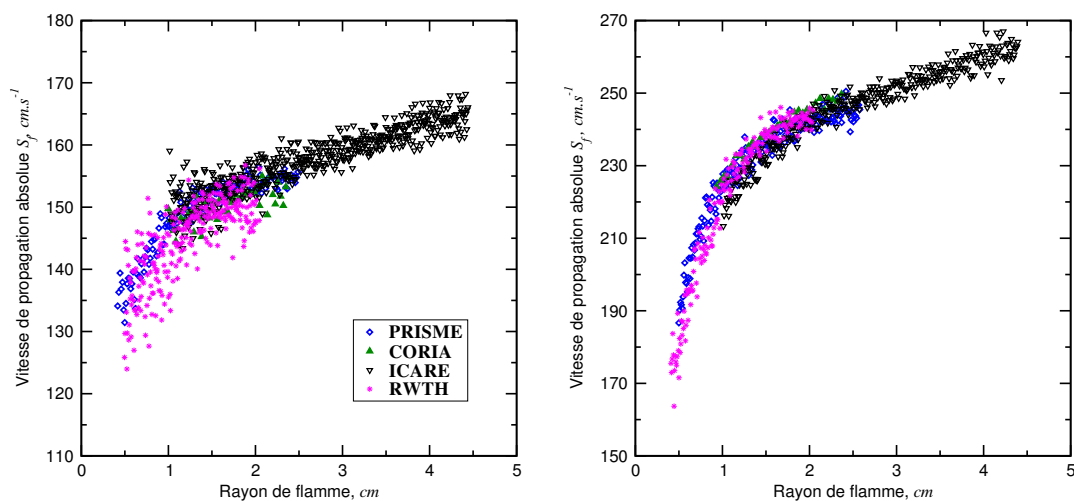
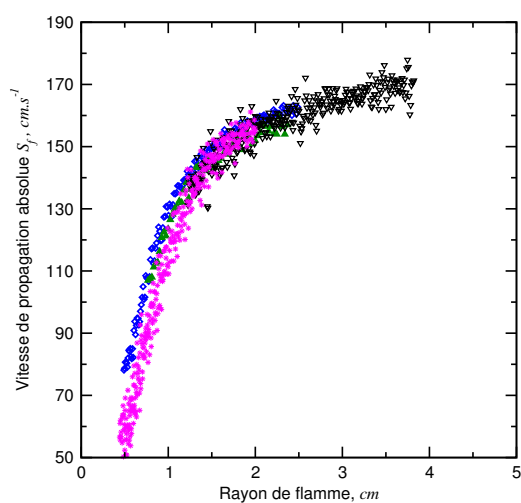
(a) $\phi = 0.8$ (b) $\phi = 1.1$ (c) $\phi = 1.3$

FIGURE 7.8 – Représentation de la vitesse de propagation absolue S_f en fonction du rayon de flamme R_f mesurée pour trois richesses sur quatre dispositifs expérimentaux différents aux conditions thermodynamiques atmosphériques.

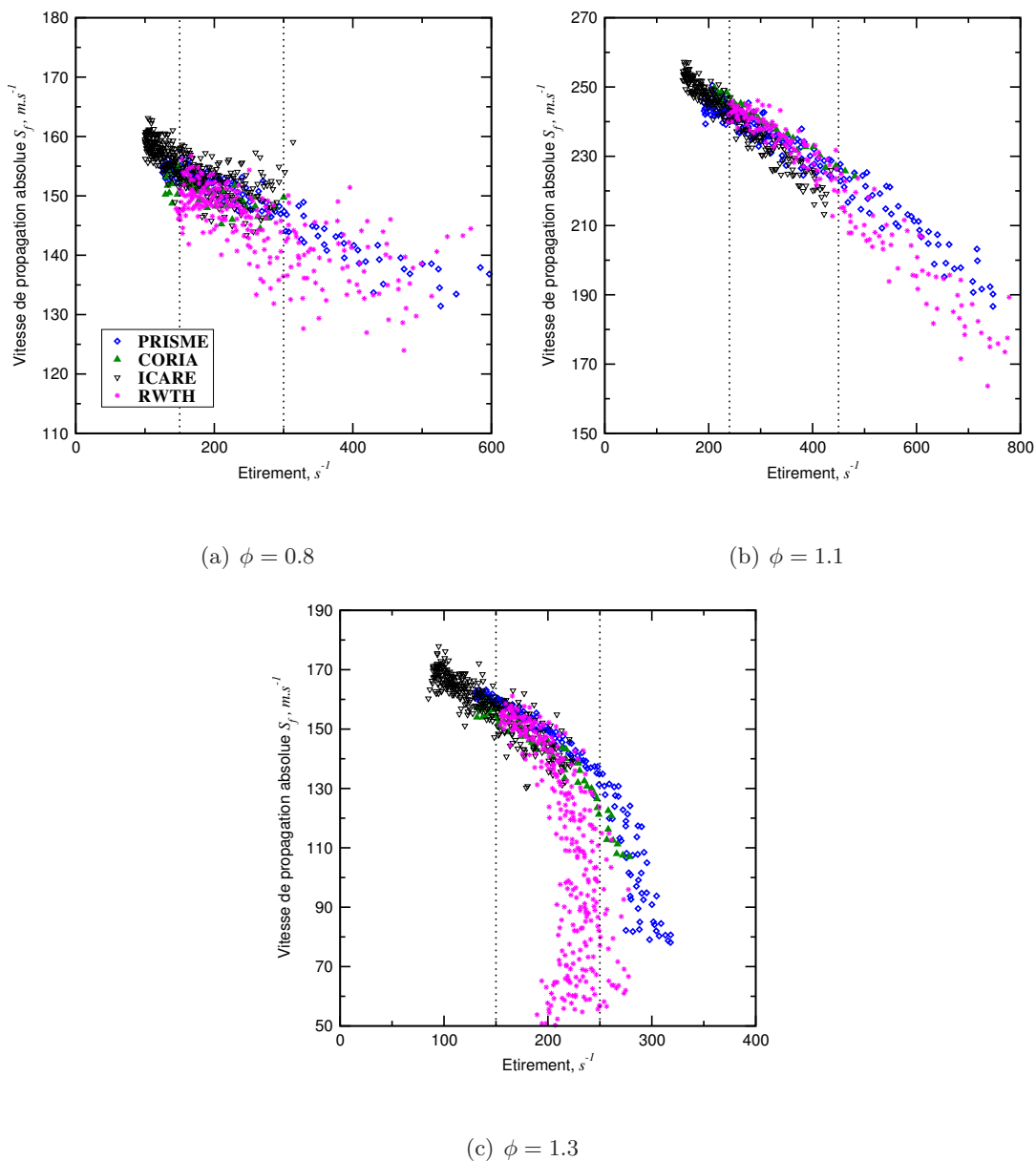


FIGURE 7.9 – Représentation de la vitesse de propagation absolue S_f en fonction de l'étirement du front de flamme κ mesurée pour trois richesses sur quatre dispositifs expérimentaux différents aux conditions thermodynamiques atmosphériques.

7.6 Conclusion

Au final, les résultats présentés dans ce chapitre permettent de démontrer l'homogénéité des mesures effectuées sur les dispositifs des laboratoires PRISME et CORIA. Ils démontrent une parfaite compréhension des processus de préparation et de gestion des mélanges combustibles sur ces installations. De plus, la parfaite répétabilité de chacune des mesures assure un poids statistique des résultats, sans dérive ni fluctuation tir à tir.

La comparaison directe des vitesses de propagation pour plusieurs richesses d'un mélange CH_4/air , effectuée à la mise en place de la collaboration CPII, a permis de conclure sur l'influence du dispositif expérimental et du diagnostic optique associé. Les résultats ont montré une très bonne cohésion entre tous les dispositifs utilisés sur l'ensemble des mesures effectuées. Notons que tous ces dispositifs sont basés sur la même configuration de flamme en expansion sphérique dans une enceinte fermée. De plus, pour la gamme de rayon $1 < R_f < 2 \text{ cm}$, correspondant à la zone d'intérêt pour les dispositifs des laboratoires CORIA et PRISME, les mesures des différents dispositifs présentent une bonne cohésion, avec une évolution en fonction du rayon comme de l'éirement non influencée par des phénomènes de perturbations extérieur (allumage, confinement...). Cette vérification valide l'utilisation des dispositifs des laboratoires PRISME et CORIA pour estimer la vitesse de combustion laminaire.

Pour conclure sur un cas général, le volume d'une cellule de mesure doit être choisie en fonction de la gamme de rayons de flamme souhaitée et le dispositif optique sélectionné en fonction des paramètres désirés, tels que :

1. les techniques d'ombroscopie ou de strioscopie donnent accès aux rayons de flamme, définis sur l'iso-surface où le gradient d'indice de réfraction est maximal. Ces deux techniques donnent accès à une seule définition de la vitesse de combustion laminaire : $\tilde{S}_{d,b}$ Eq. 3.46.
2. la technique de tomographie laser donne accès au rayon de flamme défini sur l'isotherme d'évaporation de l'huile utilisée ($T_{iso} \sim 570 \text{ K}$ ici) et en plus à la vitesse des gaz frais en amont du front de flamme. Elle permet ainsi l'utilisation d'une seconde expression pour déterminer la vitesse de combustion laminaire : $\tilde{S}_{d,u}$, Eq. 3.45.

Conclusion

Les dispositifs numériques et expérimentaux exploités au cours de cette thèse sont nombreux et donnent accès à de nombreuses possibilités et paramètres caractéristiques pour l'étude des flammes SEF de prémélange.

Trois codes numériques sont employés pour réaliser des simulations DNS représentatives des configurations et paramètres étudiés. Les deux premiers sont les codes mondialement reconnus *A-SURF* et *TORC*, respectivement des équipes du professeur *Z. Chen* et *F.N. Egolfopoulos*. Ils permettent de réaliser des simulations 1D sphériques et ont été utilisés au cours de plusieurs collaborations. Le troisième est le code *YALES 2* développé au sein du laboratoire CORIA. Il permet des simulations 3D de flammes SEF dans un domaine qui reproduit la configuration expérimentale du dispositif de mesure du laboratoire CORIA et résout les équations numériques de manière parfaitement conservative. Les résultats issus des simulations réalisées par ces codes vont pouvoir être exploités pour des analyses théoriques et vont permettre d'opérer des comparaisons directes expérience/numérique sur des paramètres communs.

Pour effectuer les expériences, deux dispositifs complémentaires ont été utilisés. Ils sont basés sur des cellules de mesures closes, de forme et de volume différents. Les diagnostics optiques sont aussi propres à chacun. Au laboratoire PRISME, le diagnostic optique repose sur la technique d'ombroscopie. Il permet de définir la LBV à partir de l'équation 3.46 de $\tilde{S}_{d,b}$ avec un rayon de flamme identifié sur l'iso-surface où le gradient d'indice de réfraction est maximal. Alors qu'au laboratoire CORIA, le diagnostic employé est la tomographie laser qui définit le rayon de flamme sur l'isotherme d'évaporation des gouttes d'huiles utilisées et donne accès aux deux définitions $\tilde{S}_{d,b}$ et $\tilde{S}_{d,u}$, Eq. 3.45, en déterminant le profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme.

La gestion des paramètres thermodynamiques, la préparation des mélanges combustibles et la fiabilité des mesures qu'ils permettent ont été démontrés et ont fait l'objet d'une collaboration entre quatre laboratoires européens. Cette collaboration, exploitant plusieurs dispositifs

expérimentaux, a fait l'analyse des différents biais sur la détermination expérimentale de la LBV et se complète avec les récents travaux numériques de *Z.Chen* [7] qui passent en revue les différentes sources d'incertitudes sur la mesure de cette vitesse pour la configuration de flamme en expansion sphérique. Elle a permis, en plus de démontrer l'exactitude des mesures effectuées sur les dispositifs des laboratoires PRISME et CORIA, de conclure que les facteurs principaux de la large gamme de valeur de la vitesse de combustion laminaire S_l^0 , qui peut se trouver dans la littérature pour un couple mélange/conditions thermodynamiques, ne peut pas s'expliquer uniquement par l'incertitude des mesures. En effet, différents dispositifs et programmes de post-traitement ont abouti à des valeurs comparables de vitesses de flammes étirées. La majeure partie de l'incertitude semble donc être induite lors de l'exploitation des mesures brutes, notamment par le modèle sélectionné pour exprimer la LBV et le modèle d'extrapolation à étirement nul qui lui est associé. En effet, comme il a été vu dans les chapitres précédents, les vitesses étirées $\tilde{S}_{d,u}$ et $\tilde{S}_{d,b}$ présentent des valeurs et une évolution avec l'étirement différentes. De plus, les mesures se présentent sous forme de nuages de points et l'introduction, pour estimer la vitesse de combustion laminaire S_l^0 , de modèles d'extrapolation à étirement nul représente donc un post-traitement possiblement sujet à de fortes incertitudes.

Troisième partie

Développement théorique nouveau,
exploitation et analyse des résultats

Chapitre 8

Définition et analyse des vitesses de flamme associées à la vitesse de combustion laminaire

Ce chapitre présente l'étude de la définition et de la mesure de la vitesse de combustion laminaire S_l^0 à partir de l'intégrale du taux de réaction d'une espèce quelconque k , réactive ou produite, pour les flammes en expansion sphérique. Le chapitre précédent a montré une partie des difficultés expérimentales sur l'estimation de S_l^0 à partir des expressions de la vitesse de déplacement normalisée $\tilde{S}_{d,u}$ et $\tilde{S}_{d,b}$. Le but de ce chapitre est de présenter une autre méthode, basée sur la vitesse de consommation, pour estimer avec précision la vitesse de combustion laminaire. Dans un premier temps, une définition explicite de la vitesse de consommation est proposée à partir de l'équation bilan de conservation des espèces dans des domaines sphériques ouverts puis fermés, pour exprimer sans ambiguïté tous ces paramètres : rayon de flamme, densité, fraction massique... Puis une nouvelle méthode de traitement des images de tomographie laser, permettant l'accès à la vitesse de consommation définie à partir de la densité des gaz frais et de sa sensibilité à l'étirement, i.e. la longueur de Markstein associée, est présentée. Une validation complète, numérique et expérimentale, de cette méthode est proposée avant la présentation et l'analyse de résultats expérimentaux sur différents mélanges aux nombres de Lewis variés. Au final, un bilan sur l'ensemble des équations utilisées expérimentalement est présenté en définissant clairement leurs hypothèses, sources d'incertitudes et pertinences. Cette nouvelle méthode de détermination de la vitesse de consommation a été présentée dans son

ensemble au cours de l'European Combustion Meeting 2015. Le développement de ces équations, leur validation ainsi que l'exploitation expérimentale font l'objet de deux publications distinctes en cours.

Sommaire

8.1	Développement théorique explicite de la vitesse de consommation en configuration de flamme laminaire sphérique	155
8.1.1	Définition pour un domaine sphérique ouvert	157
8.1.2	Définition pour un domaine sphérique fermé	160
8.1.3	Validité des hypothèses	163
8.2	Analyse à partir de résultats numériques	164
8.2.1	Les équations de la vitesse de consommation	164
8.2.2	Impact des rayons équivalents sur la détermination expérimentale de la vitesse de consommation	167
8.3	Nouvelle méthode de mesure de la vitesse de consommation	172
8.3.1	Méthode de détermination de la densité instantanée des gaz frais	173
8.3.2	Validation numérique de l'équation	175
8.3.3	Application sur des données expérimentales	176
8.4	Détermination expérimentale de la vitesse de consommation	178
8.4.1	Détermination expérimentale du terme de compression à l'aide du signal de pression	179
8.4.2	Superposition de résultats numériques et expérimentaux	181
8.4.3	Résultats expérimentaux sur des mélanges au nombre de Lewis différent de 1	182
8.5	Conclusion sur la mesure de la vitesse de consommation	187
8.6	Bilan des équations expérimentalement exploitables pour mesurer la vitesse de combustion laminaire	189

8.1 Développement théorique explicite de la vitesse de consommation en configuration de flamme laminaire sphérique

La vitesse de consommation des flammes laminaires en expansion sphérique libre et la longueur de Markstein associée, définissant la sensibilité à l'étirement, ont été présentées dans la première partie à la section 3.4.2. Ces deux quantités sont essentielles notamment pour l'étude des flammes turbulentes, caractéristiques de la majorité des procédés de combustions industrielles ou de création d'énergie. En particulier, certains modèles de combustion turbulente utilisent la vitesse de consommation pour représenter directement le taux de combustion [172, 173, 174]. Pour des approches numériques de type RANS, ces deux quantités sont par exemple utilisées dans le modèle de densité de surface de flamme. Ce modèle exprime le taux de réaction à partir du produit de la densité de surface de flamme, définie comme l'aire de la flamme par unité de volume, avec le taux de consommation local par unité de surface qui est égal à la vitesse de consommation [175]. Or cette vitesse est reliée à la vitesse de combustion laminaire S_l^0 par un facteur d'étirement noté I_0 [176] et représenté avec une corrélation linéaire de type Markstein [63, 177] par :

$$I_0 = \frac{S_c}{S_l^0} = 1 - \ell_c \frac{K}{S_l^0}, \quad (8.1)$$

où ℓ_c est la longueur de Markstein associée à la vitesse de consommation.

Pour des approches numériques plus complexes de type LES avec chimie tabulée, des flammes de prémélange laminares 1D filtrées sont utilisées pour prendre en compte les caractéristiques de la chimie complexe réaliste. Les coefficients du taux de réaction et les termes de transport non résolus sont tabulés en fonction d'une variable d'avancement, de la fraction de mélange et de la taille du filtre LES [178]. Puis l'interaction combustion/turbulence est modélisée à l'aide d'un facteur de plissement. Or il a été démontré par de récents travaux sur l'allumage forcé [179] que les effets d'étirement doivent être introduits directement dans la modélisation du taux de combustion filtré pour prédire précisément les premiers instants de la propagation d'un noyau de flamme soumis à de fortes contraintes d'étirement (rappel : l'étirement est inversement proportionnel à la surface du front de flamme, Eq. 3.1). Cette inclusion peut être réalisée à partir de valeur fiable et précise de la longueur de Markstein. Il a également été démontré dans des cas particuliers, comme la modélisation déflagration ventilée, que le développement du noyau initial de flamme est très sensible aux propriétés de transport qui affectent la longueur de Markstein [180]. La longueur de Markstein est aussi importante dans la modélisation de la

G-équation où elle est introduite à travers un terme de diffusion pour la simulation numérique directe de cette équation [181], pour prévenir la formation de résultats non physiques. Une expression fermée de cette équation instantanée de la *G*-équation a déjà été proposée [182].

C'est pourquoi la détermination expérimentale de la vitesse de consommation et de la longueur de Markstein associée sont de première importance. Néanmoins, l'évaluation du taux de réaction $\dot{\omega}$ n'est pas possible expérimentalement et oblige à reformuler l'expression de la vitesse de consommation à l'aide de paramètres mesurables. Dans cet objectif, les récents travaux numériques de *Bonhomme et al.* [82] ont, à partir de l'équation de conservation de la masse, proposé d'utiliser la vitesse de consommation de l'espèce réactive minoritaire (Eq. 3.26) dont l'expression est pour rappel :

$$\langle S_{c,r} \rangle = \frac{dR_r}{dt} - \frac{(R_0^3 - R_r^3)}{3R_r^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt},$$

avec R_0 le rayon interne d'une cellule sphérique fermée et R_r un rayon représentatif du front de flamme construit à partir de l'espèce réactive minoritaire (Eq.3.25). Puis à l'aide de simulations DNS de flammes cylindriques, ils ont montré qu'avec l'introduction d'une hypothèse de compression isentropique des gaz frais pendant la propagation de la flamme, cette dernière équation pouvait être reformulée pour au final définir la vitesse de consommation d'une espèce réactive k minoritaire (Eq. 3.28) par :

$$\langle S_{c,r} \rangle = \underbrace{\frac{dR_r}{dt} - \frac{R_0^3 - R_r^3}{3R_r^2} \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}}_{\text{LHS}} = \underbrace{\frac{1}{4\pi R_r^2 \rho_u Y_{k,u}} \int_V (\dot{\omega}_k) dV}_{\text{RHS}}.$$

Cette expression relie le taux de réaction de l'espèce réactive minoritaire $\dot{\omega}_k$, paramètre accessible uniquement numériquement, à des paramètres mesurables : le rayon de flamme R_r , la pression P et leur dérivée temporelle. Elle permet donc de pouvoir effectuer des comparaisons directes expériences/simulations pour par exemple valider un schéma cinétique en comparant les valeurs de la vitesse de consommation étirée et confronter la sensibilité à l'étirement de la flamme reproduite numériquement à celle de la flamme réelle.

Dans ces travaux, le rayon de flamme R_r , dénominateur sur les deux parties (LHS et RHS) de l'Eq. 3.28, a été défini arbitrairement égal à un rayon équivalent déterminé à partir de la masse totale de l'espèce k (réactif limitant) dans tout le domaine. La définition du rayon équivalent R_r a été discutée dans plusieurs publications [172, 173, 174] mais jamais explicitement résolue à notre connaissance. Pourtant, la valeur de la longueur de Markstein est directement conditionnée par la définition de ce rayon.

Partant de ce constat, la suite de ce chapitre présente le développement des équations de conservation des espèces pour des domaines sphériques ouvert et fermé afin de définir sans ambiguïté la vitesse de consommation et le rayon de flamme associé sans ambiguïté. Les hypothèses introduites pour la dérivation des équations seront clairement exposées et leur validité démontrée.

8.1.1 Définition pour un domaine sphérique ouvert

Dans l'objectif de définir la vitesse de consommation pour une flamme 3D sphérique avec une définition explicite de chacun des paramètres qui la compose, l'équation de transport de la fraction massique d'une espèce réactive k est utilisée. A partir d'une loi de diffusion de Fick, cette équation s'exprime :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k, \quad (8.2)$$

où \vec{u} représente la vitesse locale de l'écoulement fluide et ρ la densité locale.

Hypothèses introduites pour le développement : les profils de densité et de fraction massique d'une espèce quelconque k sont supposés constants à travers le front de flamme, d'épaisseur constante, et se propager à la vitesse absolue de celui-ci : S_f , i.e. un état quasi-stationnaire de la flamme.

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k) = 0 \iff \begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} \rho = 0 \\ \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} Y_k = 0 \end{cases} \quad (8.3)$$

A partir de ces hypothèses, les équations se développent de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (8.4)$$

$$\begin{aligned} &\iff \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k \\ &\iff -\rho \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} Y_k - Y_k \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} \rho + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k \\ &\iff -\vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k) + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k. \end{aligned} \quad (8.5)$$

On opère alors l'intégrale volumique dans un domaine sphérique de $R = 0$ à $R = \infty$:

$$-\int_V (\vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV + \int_V (\vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k) dV = \int_V [\vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k)] dV + \int_V (\dot{\omega}_k) dV \quad (8.6)$$

$$\iff -\int_V (|S_f| \cdot \vec{n} \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV + \int_V (\vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k) dV = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.7)$$

Notons que :

1.

$$\int_V (\vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k) dV = \oint \rho |u| Y_k dA = Y_{k,u} \dot{M}, \quad (8.8)$$

avec A une surface de contrôle qui définit le front de flamme.

2. $|S_f|$ est supposée constante dans le front de flamme.

La normale au front de flamme \vec{n} définie comme :

$$\vec{n} = \frac{\vec{\nabla} Y_k}{|\vec{\nabla} Y_k|} \quad (8.9)$$

est alors introduite et permet d'exprimer la vitesse de propagation comme :

$$\vec{S}_f = S_f \cdot \vec{n} . \quad (8.10)$$

D'où :

$$- S_f \int_V (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV + Y_{k,u} \dot{M} = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.11)$$

L'intégrale à gauche peut se développer comme :

$$\int_V (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV = \int_V (\vec{\nabla} (\rho Y_k \vec{n})) dV - \int_V \rho Y_k \vec{\nabla} \cdot \vec{n} dV. \quad (8.12)$$

Or en coordonnées sphérique, la divergence de la normale est définie par :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{n} = \frac{2}{r}. \quad (8.13)$$

De plus,

$$\int_V (\vec{\nabla} (\rho Y_k \vec{n})) dV = \oint \rho Y_k dA = \rho_u Y_{k,u} A_{0,u} = \rho_u Y_{k,u} \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{n} dV \quad (8.14)$$

L'équation 8.11 se réécrit alors :

$$- S_f \int_V (\rho_u Y_{k,u} - \rho Y_k) \frac{2}{r} dV + Y_{k,u} \dot{M} = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.15)$$

$$\Leftrightarrow S_f \int_V (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) \frac{2}{r} dV + Y_{k,u} \dot{M} = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.16)$$

Cette dernière expression permet de définir un rayon de flamme équivalent $R_{eq,k}$ correspondant à la position de l'interface où la vitesse de déplacement correspond à la vitesse de consommation de l'espèce k par la flamme, telle que :

$$\begin{aligned} \int_V (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) \frac{2}{r} dV &= 4\pi \int_0^{R_{eq,k}} (\rho_b Y_{f,b} - \rho_u Y_{f,u}) 2r dr + 4\pi \int_{R_{eq,k}}^{R_0} 0 \\ &= 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) \end{aligned} \quad (8.17)$$

$$R_{eq,k} = \sqrt{\frac{\int_V (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 2r dr}{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}} = \sqrt{\int_V \left(\frac{\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}} \right) 2r dr} \quad (8.18)$$

Dans cette expression du rayon de flamme équivalent $R_{eq,k}$, l'état thermodynamique associé au gaz brûlés ρ_b et la fraction massique de l'espèce k associée $Y_{k,b}$ sont fixés aux valeurs à l'état d'équilibre thermodynamique. Il peut donc être une source d'incertitude pour certains mélanges où l'impact des effets de diffusion préférentielle associés au nombre de Lewis effectif du mélange et de l'étirement du front de flamme sont présents. En effet, cet état d'équilibre n'est pas nécessairement atteint dans les gammes de rayon classiquement étudiées expérimentalement : $8 < R_{exp} < 25 \text{ mm}$.

A partir de l'introduction de ce rayon, l'Eq. 8.16 s'exprime comme :

$$S_f 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) + Y_{k,u} \dot{M} = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.19)$$

Soit une expression de l'intégrale volumique du taux de réaction de l'espèce k définie par :

$$\int_V (\dot{\omega}_k) dV = S_f 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) + \rho_u Y_{k,u} 4\pi R_{eq,k}^2 u_{R_{eq,k}}. \quad (8.20)$$

La vitesse de consommation exprimée en configuration de flamme sphérique doit vérifier par développement asymptotique pour de grands rayons de flamme la forme de la vitesse de consommation exprimée pour une configuration de flamme 1D plane (Eq. 2.22) [11], de la forme :

$$\langle S_{c,k} \rangle_{Theorique\ 1D} = \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u)} \int_V (\dot{\omega}_k) dr.$$

Seule une expression vérifiant cette condition est comparable à la vitesse de combustion laminaire. Dès lors, pour définir la vitesse de consommation à partir de l'expression du taux de réaction qui vient d'être exprimée (Eq. 8.20) dans un domaine sphérique non confiné, seule une équation de la forme :

$$\langle S_{c,k} \rangle_{Theorique\ 3D\ sphérique} = \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u) R^2} \int_0^\infty (\dot{\omega}_k) r^2 dr, \quad (8.21)$$

peut être utilisée. Dans cette équation théorique, le rayon R est un rayon représentatif de la position du front de flamme. Au vue du développement exprimant le taux de réaction, le rayon représentatif du front de flamme le plus pertinent à utiliser est le rayon $R_{eq,k}$. Il permet de définir une équation de la vitesse de consommation dans sa forme générique pour une espèce réactive f comme :

Au final, l'équation de consommation moyennée spatialement d'une espèce k dans un domaine sphérique ouvert s'exprime comme :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,k} \rangle_{Unconfined} &= S_f \frac{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} + \frac{Y_{k,u}}{(Y_{k,b} - Y_{k,u})} u_{R_{eq,k}} \\ &= \frac{1}{4\pi \rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u}) R_{eq,k}^2} \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \end{aligned} \quad (8.22)$$

On peut noter que cette forme complexe peut être simplifiée en définissant l'espèce k comme l'espèce minoritaire de la réaction de combustion (DRS), soit :

- k = carburant si $\phi \leq 1$,
- k = oxydant si $\phi > 1$.

La fraction massique de l'espèce DRS dans les gaz brûlés est alors négligeable et l'estimation ambiguë de $Y_{k,b}$ n'est pas nécessaire puisque :

$$Y_{DRS,b} \approx 0. \quad (8.23)$$

L'expression simple de la vitesse de consommation $\langle S_c \rangle_{Unconfined}$ définie à partir d'une espèce qui ne nécessite pas l'estimation de valeurs dans les gaz brûlés, complexes et ambiguës selon les mélanges, est finalement :

$$\langle S_{c,DRS} \rangle_{Unconfined} = S_f - u_{R_{eq,DRS}} = -\frac{1}{4\pi (\rho_u Y_{k,u}) R_{eq,DRS}^2} \int_V (\dot{\omega}_{DRS}) dV, \quad (8.24)$$

où l'acronyme DRS représente l'espèce réactive minoritaire de la réaction de combustion.

8.1.2 Définition pour un domaine sphérique fermé

Le développement pour un domaine d'intégration fermé part comme précédemment de l'équation de transport de la fraction massique 8.2 exprimée avec l'hypothèse d'une loi de diffusion de Fick :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k. \quad (8.25)$$

Hypothèses introduites pour le développement en domaine fermé : les profils de densité et de fraction massique de fuel sont supposés constants à travers le front de flamme, d'épaisseur constante et se propageant à la vitesse absolue S_f , tels que :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{S}_f \cdot \frac{\vec{\nabla} \rho}{\rho} = \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \quad (8.26)$$

pour permettre de prendre en compte les effets de compression dans un domaine fermé et

$$\frac{\partial Y_f}{\partial t} + \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} Y_k = 0 \quad (8.27)$$

avec S_f la vitesse absolue de l'iso-contour Σ définissant la position du front de flamme.

En utilisant ces hypothèses, les équations se développent de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k = \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k \quad (8.28)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow \rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + Y_k \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k &= \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k \\ \Leftrightarrow -\rho \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} Y_k - Y_k \vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} \rho + Y_k \frac{\rho}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k &= \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k \\ \Leftrightarrow -\vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k) + Y_k \frac{\rho}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k &= \vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k) + \dot{\omega}_k. \end{aligned} \quad (8.29)$$

On opère alors l'intégrale volumique dans un domaine sphérique de rayon interne R_0 :

$$\begin{aligned} - \int_V (\vec{S}_f \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV + \int_V \left(Y_k \frac{\rho}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \right) dV + \int_V (\vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k) dV = \\ \int_V [\vec{\nabla} \cdot (\rho D \vec{\nabla} Y_k)] dV + \int_V (\dot{\omega}_k) dV \end{aligned} \quad (8.30)$$

$$\Leftrightarrow - \int_V (S_f \cdot \vec{n} \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV + \int_V \left(Y_k \frac{\rho}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \right) dV + \int_V (\vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k) dV = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.31)$$

Notons que :

1.

$$\int_V (\vec{\nabla} \cdot \rho \vec{u} Y_k) dV = \oint \rho |u| Y_k dA = 0, \quad (8.32)$$

car puisque le domaine est fermé, les vitesses sont nulles aux extrémités du domaine.

2. S_f est toujours supposée constante quelle que soit sa position dans le front de flamme.

D'où :

$$- S_f \int_V (\vec{n} \cdot \vec{\nabla} (\rho Y_k)) dV + \int_V \left(Y_k \frac{\rho}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \right) dV = \int_V (\dot{\omega}_k) dV \quad (8.33)$$

$$\Leftrightarrow S_f \int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 2r dr + \int_0^{R_0} \left(4\pi \rho Y_f \underbrace{\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}}_{=cste} r^2 \right) dr = \int_V (\dot{\omega}_k) dV. \quad (8.34)$$

Il a été démontré dans la section précédente que la première intégrale du terme de gauche peut prendre la forme :

$$\int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 2r dr = 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}), \quad (8.35)$$

avec un rayon équivalent R_{eq} défini comme :

$$R_{eq,k} = \sqrt{\int_V \left(\frac{\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}} \right) 2r dr}. \quad (8.36)$$

Pour la deuxième intégrale du terme de gauche, un nouveau rayon équivalent $R_{eq2,k}$ est introduit.

Il est défini par :

$$\begin{aligned} \int_0^{R_0} \left(4\pi \rho Y_k \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} r^2 \right) dr &= 4\pi \frac{1}{\rho_u} \frac{\partial \rho_u}{\partial t} \int_0^{R_0} \rho Y_k r^2 dr \\ &= 4\pi \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \left[\int_0^{R_{eq2,k}} \rho_b Y_{k,b} r^2 dr + \int_{R_{eq2,k}}^{R_0} \rho_u Y_{k,u} r^2 dr \right] \\ &= \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \frac{4}{3} \pi \left(R_0^3 \rho_u Y_{k,u} + R_{eq2,k}^3 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) \right). \end{aligned} \quad (8.37)$$

Soit une expression de $R_{eq2,k}$:

$$R_{eq2,k} = \sqrt[3]{\frac{\int_0^{R_0} (\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}) 3r^2 dr}{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}} = \sqrt[3]{\int_0^{R_0} \left(\frac{\rho Y_k - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}} \right) 3r^2 dr} \quad (8.38)$$

En introduisant les équations des rayons équivalents Eq. 8.36 et Eq. 8.38, l'intégrale volumique du taux de réaction de l'espèce k s'exprime :

$$\int_V (\dot{\omega}_k) dV = S_f 4\pi R_{eq,k}^2 (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) + \frac{4}{3} \pi \rho_u Y_{k,u} \frac{1}{\rho_u} \frac{\partial \rho_u}{\partial t} (R_0^3 - R_{eq2,k}^3) \quad (8.39)$$

Comme précédemment, pour définir la vitesse de consommation, comparable à la vitesse de combustion laminaire Eq. 2.22 dans la limite asymptotique des très grands rayons, il faut introduire l'expression théorique :

$$\langle S_{c,k} \rangle_{Theorique\ 3D\ sphérique} = \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u) R^2} \int_0^\infty (\dot{\omega}_k) r^2 dr,$$

La vitesse de consommation moyennée spatialement d'une espèce k quelconque dans un domaine sphérique fermée est alors :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,k} \rangle_{Confined} &= S_f \frac{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} + \frac{\rho_u Y_{k,u} R_0^3 + (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) R_{eq2,k}^3}{3\rho_u (Y_{f,b} - Y_{f,u}) R_{eq,k}^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \\ &= \frac{1}{\rho_u (Y_k^b - Y_k^u) R_{eq,k}^2} \int_V (\dot{\omega}_k) r^2 dr \end{aligned} \quad (8.40)$$

Cette dernière expression peut être simplifiée en définissant l'espèce k comme l'espèce minoritaire de la réaction de combustion (DRS), avec :

- $k =$ carburant si $\phi \leq 1$,
- $k =$ oxydant si $\phi > 1$.

La fraction massique de l'espèce DRS dans les gaz brûlés est négligeable et l'estimation ambiguë de la fraction massique dans les gaz brûlés n'est pas nécessaire : $Y_{DRS,b} \approx 0$.

L'équation simplifiée de la vitesse de consommation dans un domaine sphérique fermé est au final :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,DRS} \rangle_{Confined} &= S_f - \frac{(R_0^3 - R_{eq2,DRS}^3)}{3R_{eq,DRS}^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \\ &= -\frac{1}{4\pi R_{eq,DRS}^2 \rho_u Y_{k,u}} \int_V (\dot{\omega}_k) dV, \end{aligned} \quad (8.41)$$

avec k l'espèce réactive minoritaire.

D'un point de vue expérimental, seule cette dernière équation (Eq. 8.41) peut être utilisée directement car la détermination des paramètres ρ_b et $Y_{k,b}$ caractéristiques de l'état thermodynamique et cinétique des gaz brûlés n'est pas nécessaire. Elle sera notée simplement S_c lorsqu'elle est exploitée sur des résultats expérimentaux dans la suite de ce manuscrit.

8.1.3 Validité des hypothèses

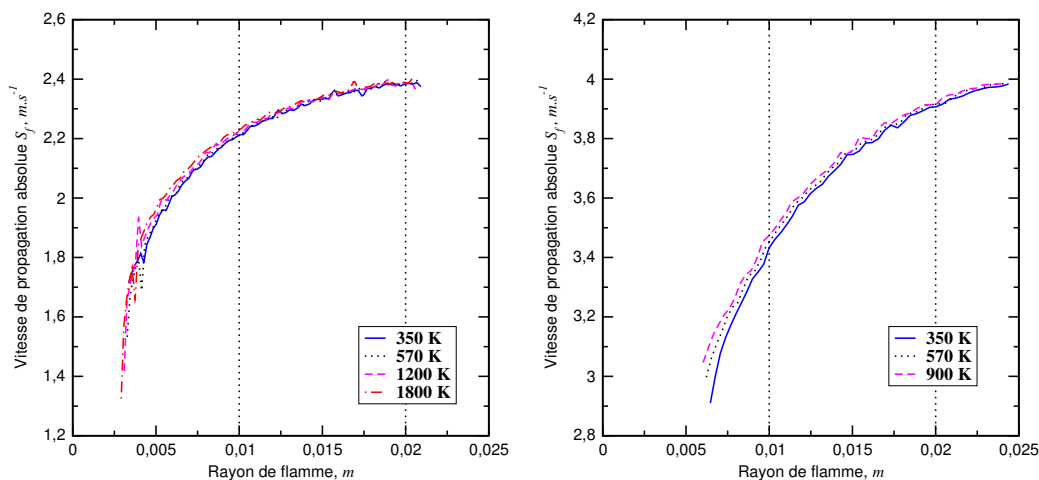
Les hypothèses introduites pour développer les équations précédentes supposent que quelle que soit l'isotherme considérée dans le front de flamme, la vitesse de propagation absolue associée à chacune, $S_{f,isoT}$, soit identique. Les figures 8.1(a) et 8.1(b), issues de simulations DNS 3D YALES2 (cf. Chap. 4), présentent l'évolution de la vitesse de propagation absolue S_f déterminée pour plusieurs isothermes contenues dans le front de flamme en fonction de leur position pour deux mélanges carburant/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

Elles démontrent que quelle que soit l'isotherme considérée dans le front de flamme, la vitesse de propagation de chacune est identique pour ces deux mélanges. Notons tout de même que le nombre de Lewis effectif de ces deux mélanges est proche de l'unité : $Le_{eff,mixture} = 1$.

Ainsi, ces résultats issus de DNS 3D reproduisant un dispositif expérimental existant sont parfaitement en accord avec les observations de *Bradley et al.* [37]. En effet, leurs travaux ont montré que l'évolution de l'épaisseur de flamme, notée ici δR , est négligeable comparée à la valeur du rayon de flamme R_f . Ainsi toutes les isothermes contenues dans le front flamme suivent la vitesse de propagation absolue de celui-ci :

$$\frac{d(R_f + \delta R)}{dt} = \frac{dR_f}{dt} = S_f. \quad (8.42)$$

Les hypothèses de base des deux développements proposés sont alors valides dans nos conditions.



(a) CH_4/air $\phi = 1.0$, $T_{adiab}^b \approx 2200 K$

(b) H_2/air $\phi = 5.0$, $T_{adiab}^b \approx 1400 K$

FIGURE 8.1 – Evolution de la vitesse de propagation absolue de plusieurs isothermes contenues dans le front de flamme en fonction de leur position pour deux mélanges carburant/air aux conditions atmosphériques de température et de pression

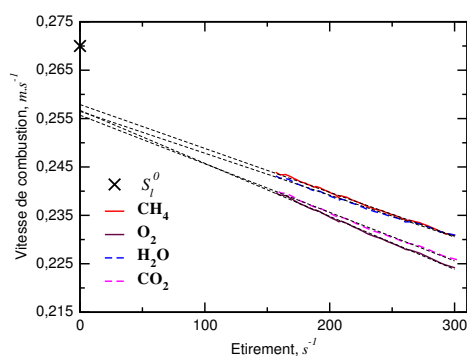
8.2 Analyse à partir de résultats numériques

Dans le cadre de cette thèse, il a été choisi de modifier et d’optimiser le code de simulation 3D *YALES2*, présenté au chapitre 4. Les résultats qui sont présentés dans cette section sont issus de simulations DNS 3D réalisées avec ce code dans un domaine de calcul reproduisant le dispositif expérimental présent au laboratoire CORIA (cf. Chap. 6). Leur but est de démontrer la validité des expressions de la vitesse de consommation qui viennent d’être développées et d’étendre les perspectives vers la mesure expérimentale de cette vitesse.

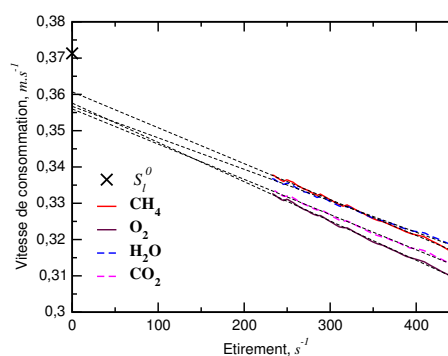
8.2.1 Les équations de la vitesse de consommation

La section précédente a présenté l’Eq. 8.41 comme étant la seule équation qui pouvait être résolue expérimentalement de manière directe car elle ne nécessite pas l’estimation de grandeurs liées aux gaz brûlés. Alors, seul le taux de réaction de l’espèce réactive déficiente, utilisé dans le terme RHS de l’Eq. 8.41, pourrait être comparé à des mesures directes. Or il serait pertinent pour la validation de schéma cinétique de pouvoir effectuer la comparaison entre des mesures directes et des taux de réaction simulés sur plusieurs espèces. Afin d’étudier l’impact de l’espèce ciblée k pour déterminer la vitesse de consommation moyennée spatialement, la figure 8.2 présente pour

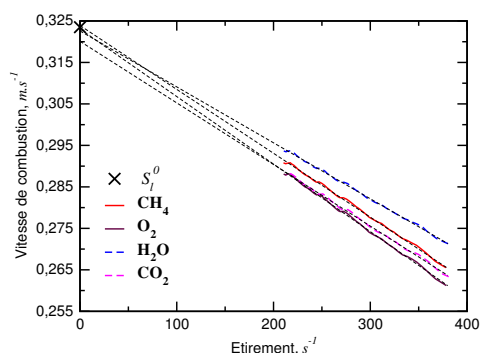
deux mélanges carburant/air, à différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression, la vitesse de consommation déterminée à partir des espèces majoritaires réactives et produites. La valeur de la vitesse de combustion laminaire issue de simulations 1D planes est représentée par une croix pour évaluer la précision de l'extrapolation de la vitesse de consommation. N.B : une étude sur la convergence de la valeur de la LBV en fonction en fonction de plusieurs schémas cinétiques n'a pas été réalisée et la valeur donnée par les simulations 1D est prise comme référence dans cette étude, mais ne représente pas la valeur exact de la LBV.



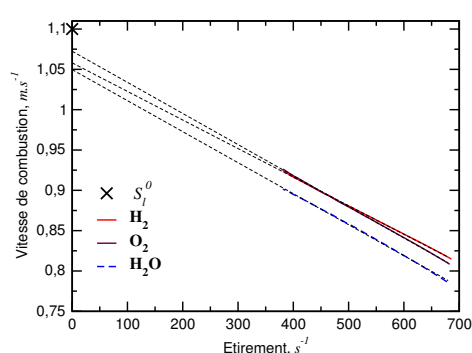
(a) CH_4/air $\phi = 0.8$



(b) CH_4/air $\phi = 1.0$



(c) CH_4/air $\phi = 1.2$



(d) H_2/air $\phi = 5.0$

FIGURE 8.2 – Evolution de la vitesse de consommation calculée à partir de plusieurs espèces en fonction de l'étirement pour deux mélanges carburant/air à différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression

Les résultats présentés dans cette figure tendent à démontrer que la vitesse de consommation est fonction de l'espèce k qui est ciblée. En effet, les valeurs de la vitesse étirée sont légèrement différentes. De plus, l'extrapolation à étirement nul de chacune de ces vitesses ne définit pas la vitesse de combustion laminaire calculée par des simulations 1D adiabatiques. Le comportement de ces flammes pour de grands rayons n'est donc pas nécessairement linéaire comme le suppose le modèle d'extrapolation présenté sur ces figures.

Pour analyser ce résultat, les figures 8.3 et 8.4 présentent respectivement l'évolution des rayons équivalents $R_{eq,k}$ (Eq. 8.18), $R_{eq2,k}$ (Eq. 8.38) et leur dérivée temporelle pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

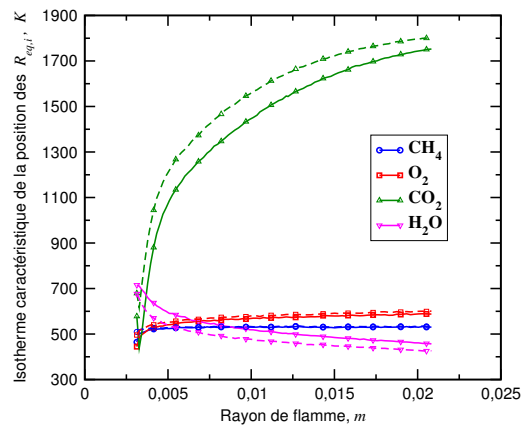


FIGURE 8.3 – Evolution de l'isotherme associée aux deux rayons équivalents $R_{eq,k}$, Eq. 8.18 (traits pleins) et $R_{eq2,k}$, Eq. 8.38 (traits pointillés) déterminés pour différentes espèces k ciblées d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques.

Elles démontrent que même si la vitesse de propagation de ces rayons est égale quelle que soit l'espèce considérée, les isothermes définies par ces rayons sont différentes. Ainsi, l'Eq. 8.41 (dans sa définition à partir de paramètres cinématiques) utilise des rayons caractéristiques de flamme différents en fonction de l'espèce ciblée. La valeur de la vitesse de consommation est alors fonction de l'espèce ciblée. Néanmoins, pour chaque flamme, les différences entre toutes les vitesses de consommation sont inférieures à $2 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ et diminuent avec le rayon de flamme, telle que la valeur maximale soit inférieure à 3% pour la flamme de CH_4/air à $\phi = 1.2$. Ainsi, la convergence de toutes ces vitesses lorsque le rayon de flamme augmente, i.e. que la configuration de flamme se rapproche de la géométrie de flamme plane non étirée, tend à être vérifiée par ces

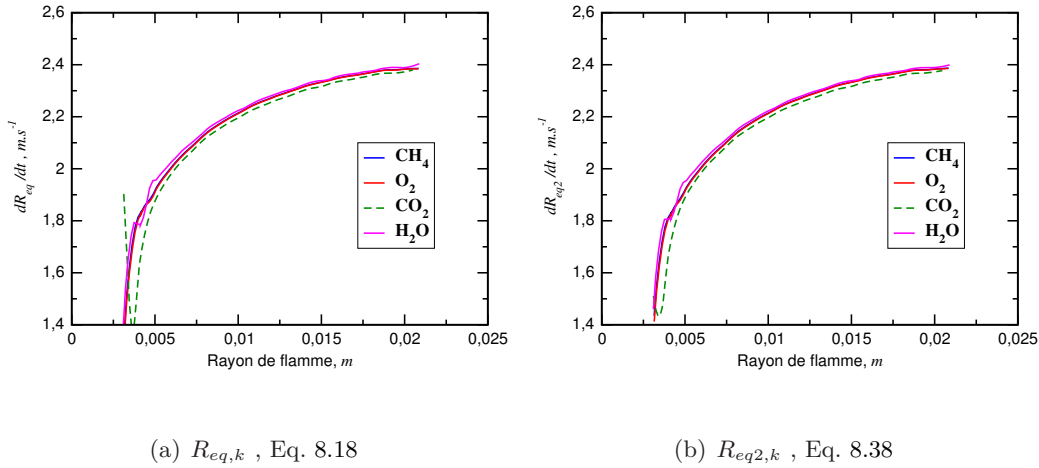


FIGURE 8.4 – Vitesse de propagation absolue des deux rayons équivalents déterminés pour différentes espèces k ciblées d’une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques.

résultats.

N.B. 1 : Il a été démontré au chapitre 3, que la vitesse de déplacement pondérée par le rapport des densités (Eq. 3.12) est fonction de la position dans le front de flamme. Dès lors, si les rayons équivalents, qui définissent la position de l’interface où la vitesse de consommation d’une espèce k est égale à la vitesse de déplacement locale, sont fonction de l’espèce ciblée k , alors la vitesse de consommation exprimée par l’équation 8.40 est propre à chacune des espèces réactives ou produites k dans la configuration de flammes sphériques.

N.B. 2 : Il faut noter par ailleurs que la position des rayons équivalents dans le front de flamme ne peut pas être reliée au nombre de Lewis de chaque espèce ou à leur ordre de disparition/apparition dans le front. En effet, l’espèce produite H_2O définit par exemple une isotherme plus proche des gaz frais comparée aux espèces réactives nécessaires à sa création (O_2 et CH_4) qui définissent des isothermes plus en aval dans le front de flamme.

8.2.2 Impact des rayons équivalents sur la détermination expérimentale de la vitesse de consommation

Pour pouvoir mesurer expérimentalement la vitesse de consommation par l’Eq. 8.41, il faut estimer l’impact de l’utilisation du rayon de flamme expérimental extrait des images de tomographie laser R_{lomo} , comparé à la valeur des deux rayons équivalents définis théoriquement :

$R_{eq,k}$ et $R_{eq2,k}$. La figure 8.5 représente tout d'abord la sensibilité de la vitesse de consommation à la définition d'un seul rayon équivalent, assimilé à la position d'une isotherme T contenue dans le front de flamme, sur une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression. L'équation résolue sur cette figure est donc :

$$\begin{aligned} \langle S_{c,DRS} \rangle_{Confined} &= S_f - \frac{(R_0^3 - R_{IsoT}^3)}{3R_{IsoT}^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} \\ &= -\frac{1}{4\pi R_{IsoT}^2 \rho_u Y_{k,u}} \int_V (\dot{\omega}_k) dV, \end{aligned} \quad (8.43)$$

où R_{IsoT} représente la position de l'isotherme T . Les résultats démontrent une estimation équi-

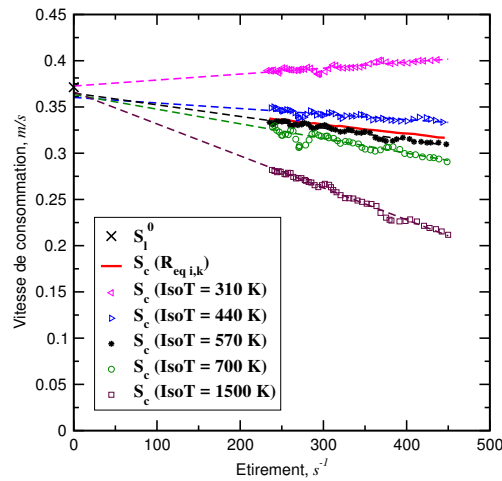


FIGURE 8.5 – Représentation de la sensibilité de la vitesse de combustion à la définition d'un seul rayon équivalent, assimilé à la position d'une isotherme T , sur une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

valente de la vitesse à étirement nul mais des vitesses étirées fonction de l'isotherme T considérée. Ces vitesses étirées, même si elles sont déterminées à partir d'une isotherme contenue dans le front de flamme, sont totalement différentes et leur extrapolation linéaire présente des pentes de signes opposé selon les cas. La définition de la vitesse de consommation par l'équation 8.43 est donc très sensible à la définition de l'isotherme considérée. La longueur de Marktein associée à cette vitesse de consommation, ℓ_c , est ainsi fonction de l'isotherme T considérée pour une même flamme. Néanmoins, on peut noter que la vitesse déterminée à l'aide de l'isotherme $T = 570 K$ est très proche de la vitesse de consommation exacte, déterminée avec les deux rayons équivalents. Or, sur le dispositif du laboratoire CORIA, le rayon R_{tomo} est assimilable à l'isotherme d'évaporation de l'huile de silicone, soit l'iso-surface repérée par la température $T = 570 K$

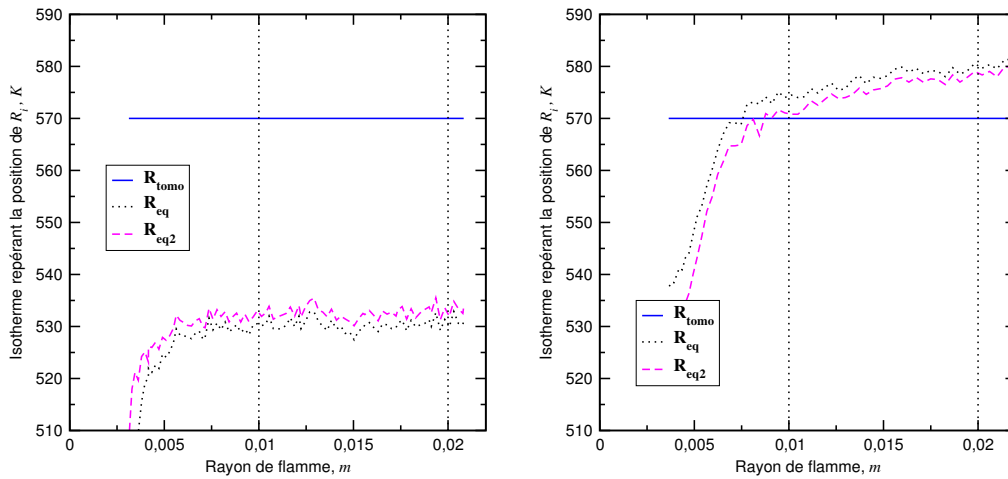
(cf. Chap 6). Ce résultat, issu des simulations DNS 3D, tend à montrer qu'il serait possible de déterminer directement et précisément la vitesse de consommation étirée avec ce dispositif expérimental sur cette flamme stoechiométrique CH_4/air . Afin d'attester de l'universalité de cette méthode, l'évolution temporelle du rayon R_{tomo} doit être comparée à celle des deux rayons équivalents $R_{eq,DRS}$ et $R_{eq2,DRS}$, accessibles uniquement numériquement, pour différents mélanges combustibles. La figure 8.6 présente l'évaluation de l'isotherme de chacun des rayons équivalents au cours du temps comparée avec l'isotherme constante d'évaporation des gouttes d'huiles de *Rhodorsil 550* à $T = 570 K$ pour trois différents mélanges aux conditions atmosphériques de température et de pression.

La figure 8.7 complète la figure précédente 8.6 pour les deux mêmes mélanges en présentant l'évolution du rapport :

$$\delta_R = \frac{R_{eq\ i} - R_{tomo}}{R_{eq\ i}}, \quad (8.44)$$

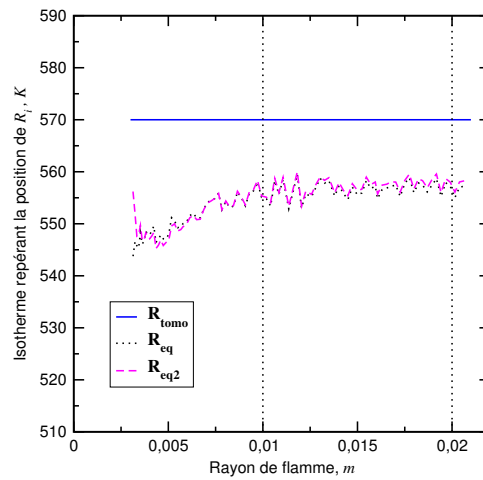
exprimé en pourcentage pour quantifier clairement la différence entre ces différents rayons. Elles démontrent que la différence est très faible, avec des valeurs du rapport δ_R inférieures à 0.1 % entre les deux rayons équivalents et le rayon expérimental dans la zone d'intérêt allant de 1 à 2 cm. De plus, chaque rayon équivalent suit quasiment l'évolution d'une même isotherme quel que soit le rayon de flamme, telle que la différence entre les deux diminue avec le rayon de flamme. Ainsi, n'utiliser qu'un seul rayon dans l'expression de la vitesse de consommation en première approximation est valide. Par ailleurs, il faut noter, comme annoncé par la figure 8.4, que les vitesses de propagation des rayons équivalents sont égales entre elles et égales à la vitesse de propagation absolue du front de flamme S_f .

En conclusion, l'utilisation du rayon de flamme expérimental apparaît valide en première approximation pour mesurer directement la vitesse de consommation en remplacement des deux rayons équivalents définis théoriquement dans l'Eq. 8.41. La faisabilité de la méthode réside alors dans la mesure, avec une précision suffisante, du terme de compression des gaz frais : $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$.



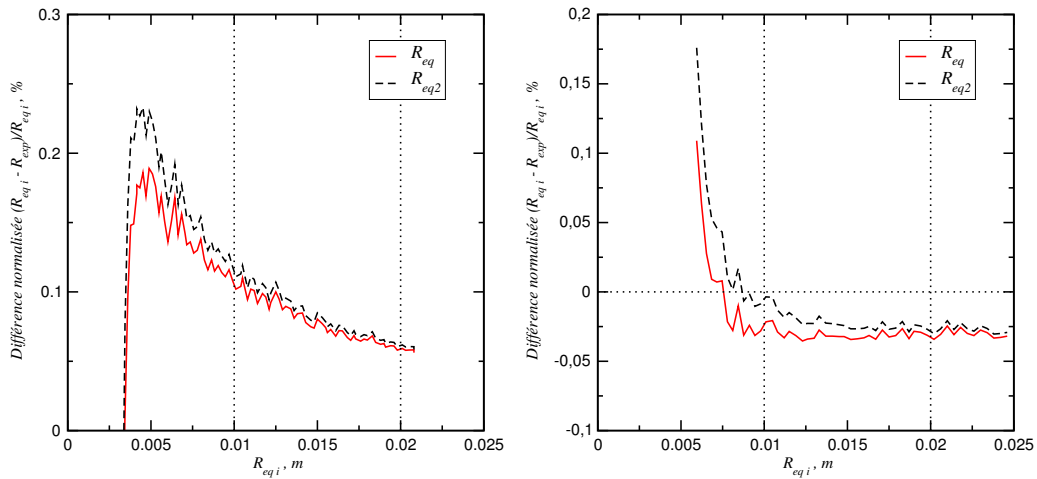
(a) CH_4/air $\phi = 1.0$

(b) H_2/air $\phi = 5.0$



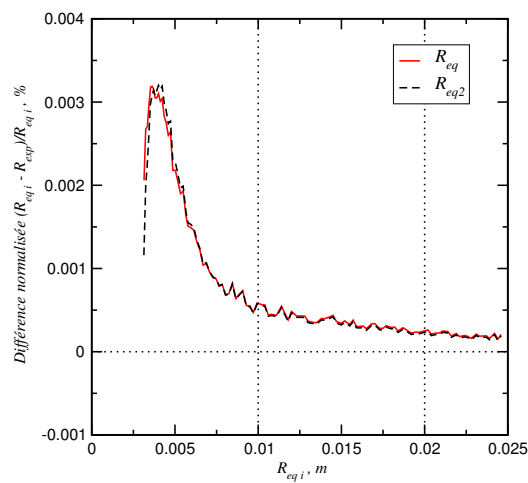
(c) C_8H_{18}/air $\phi = 1.0$

FIGURE 8.6 – Evolution de l'isotherme caractéristique des rayons numériques $R_{eq,DRS}$ et $R_{eq2,DRS}$ et expérimental R_{tomo} en fonction de la position du front de flamme pour trois différentes flammes dans les conditions atmosphériques de température et de pression.



(a) CH_4/air $\phi = 1.0$

(b) H_2/air $\phi = 5.0$



(c) C_8H_{18}/air $\phi = 1.0$

FIGURE 8.7 – Différence normalisée entre l'isotherme d'évaporation des traceurs de la tomographie laser et les deux rayons équivalents $R_{eq,DRS}$ et $R_{eq2,DRS}$ définis dans les équations de la vitesse de consommation : Eq. 8.22 et Eq. 8.40 pour différentes flammes dans les conditions atmosphériques de température et de pression.

8.3 Nouvelle méthode de mesure de la vitesse de consommation

Les sections précédentes ont permis de définir sans ambiguïté plusieurs expressions de la vitesse de consommation pour la géométrie de flamme en expansion sphérique. Ces expressions relient un terme cinétique : le taux de réaction d'une espèce k réactive ou produite avec des termes dynamiques : deux rayons équivalents caractérisant la position du front de flamme, la vitesse de propagation du front de flamme et respectivement la vitesse locale des gaz frais en $R_{eq,k}$ ou l'évolution des conditions thermodynamiques dans les gaz frais dans le cas d'un domaine ouvert ou fermé. Elles sont de formes équivalentes aux équations proposées par *Bonhomme et al.* [82] avec une définition explicite des rayons de flamme à utiliser lorsque l'espèce k est fixée comme l'espèce réactive minoritaire. Dans leurs travaux pour définir une expression mesurable de la vitesse de consommation, il a été proposé de remplacer la détermination de la masse volumique instantanée des gaz frais et sa dérivée temporelle par celle de la pression, homogène dans tout le domaine en négligeant le saut de pression dans le front de flamme, et de sa dérivée temporelle. Des expressions similaires à cette dernière forme de développement nécessitant le signal de pression se rencontrent dans les publications plus anciennes de *Linnett J.W.* [183] ou encore *Bradley et al.* [37]. Dans ces dernières, il a été mis en évidence la nécessité de pouvoir mesurer un signal de pression avec une très grande précision pour déterminer la vitesse de consommation à partir de l'Eq. 3.28. Ainsi, même si la précision des dispositifs expérimentaux ne cesse de croître au cours des années, la nécessité de pouvoir déterminer le signal de dérivée temporelle de la pression reste problématique. De plus, l'hypothèse de compression isentropique n'est pas nécessairement vraie pour l'ensemble des mélanges combustibles et conditions thermodynamiques.

Dans l'objectif de pouvoir s'abstraire de l'impact de la précision de mesure des capteurs de pression et de l'hypothèse sur l'état thermodynamique des gaz frais, cette section présente une nouvelle technique de mesure instantanée de la densité des gaz frais mise au point pour le diagnostic de tomographie laser présent au laboratoire CORIA. Une démonstration numérique puis expérimentale de cette méthode sont respectivement présentées. Au final, cette méthode est comparée à la technique utilisant le signal de pression depuis des mesures effectuées sur le dispositif du laboratoire CORIA à l'aide d'un système de mesure du signal de pression le plus adapté pour réduire son incertitude de mesure. Ce système a été présenté précédemment dans le Chap. 6.

8.3.1 Méthode de détermination de la densité instantanée des gaz frais

La méthode qui est développée ici repose sur les équations bilan de volumes quelconques ouverts. A partir d'un volume de gaz frais $V_a(t)$, contenu dans une enceinte de mesure sphérique et défini aux conditions thermodynamiques initiales avant allumage de la combustion, l'évolution temporelle de la densité des gaz frais ρ_a est suivie comme l'évolution spatiale du volume $V_a(t)$ et du flux de masse à sa surface à chaque pas de temps. En effet, la détermination de la masse contenue dans le volume $V_a(t)$ à chaque pas de temps comme la masse au temps précédent moins le flux à sa surface et la connaissance de la dimension du volume $V_a(t)$ permet de déterminer simplement la densité. Il faut noter dès lors que la résolution temporelle est conditionnée par la fréquence d'acquisition du dispositif de mesure. Le développement réalisé est décrit ci dessous.

Soit l'équation de conservation de la masse définie pour un volume matériel évoluant au cours du temps et ne contenant ni sources ni puits :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho dV = 0. \quad (8.45)$$

D'après le théorème de transport sur un volume matériel [184], l'équation 8.45 peut s'écrire :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho dV = \int_{V_m(t)} \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \oint_{A_m(t)} \rho \vec{U} \cdot \vec{n} dA = 0. \quad (8.46)$$

avec U la vitesse locale du fluide.

En introduisant l'hypothèse qu'à l'instant t le volume matériel $V_m(t)$ coïncide avec un volume de contrôle arbitraire $V_a(t)$, alors l'équation 8.46 s'exprime sous la forme [184] :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho dV = \frac{d}{dt} \int_{V_a(t)} \rho dV + \oint_{A_a(t)} \rho (\vec{U} - \vec{X}) \cdot \vec{n} dA = 0,$$

où \dot{X} est la vitesse locale de la surface $A_a(t)$.

La figure 8.8 illustre le volume de contrôle $V_a(t)$ ainsi que la direction et le sens des vecteurs \vec{n} , \vec{U} et \vec{X} . Il faut noter que si X est définie à une distance d du front de flamme imposée constante, alors la vitesse de déplacement de la surface du volume $V_a(t)$ est égale à la vitesse de propagation du front de flamme : $\dot{X}_{d=cste} = \frac{dR_f}{dt}$

Au final, l'équation projetée à résoudre est :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho dV = \frac{d}{dt} \int_{V_a(t)} \rho dV - \oint_{A_a(t)} \rho (U - \dot{X}) dA = 0. \quad (8.47)$$

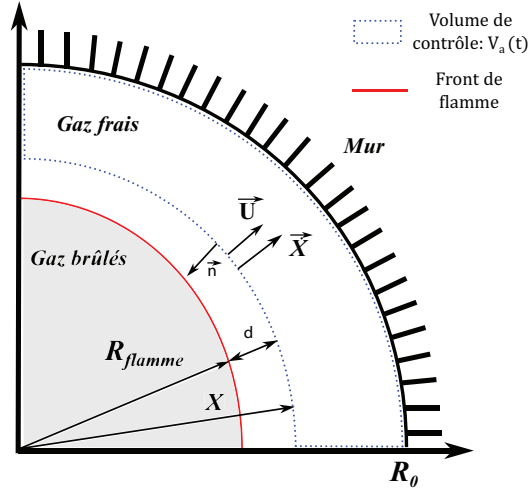


FIGURE 8.8 – Schéma des variables et vecteurs définis pour déterminer la densité des gaz frais ρ_u à partir d'un volume de contrôle.

L'intégration de cette équation entre les temps successifs t^n et t^{n+1} définit :

$$\frac{(\int \rho dV)^{n+1} - (\int \rho dV)^n}{t^{n+1} - t^n} - \oint_{\Sigma^{n+1/2}} \rho (U - \dot{X}) dA = 0. \quad (8.48)$$

La notation $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ est introduite pour la lisibilité.

L'équation 8.48 se développe dès lors sous la forme :

$$\frac{\rho^{n+1} \frac{4}{3} \pi (R_0^3 - (X^{n+1})^3) - \rho^n \frac{4}{3} \pi (R_0^3 - (X^n)^3)}{\Delta t} - \oint \rho^{n+1/2} (U^{n+1/2} - \dot{X}^{n+1/2}) dA = 0.$$

Les valeurs de ρ , U et \dot{X} sont supposées homogènes à chaque pas de temps. D'où :

$$\frac{\rho^{n+1} \frac{4}{3} \pi (R_0^3 - (X^{n+1})^3) - \rho^n \frac{4}{3} \pi (R_0^3 - (X^n)^3)}{\Delta t} - \rho^{n+1/2} (U^{n+1/2} - \dot{X}^{n+1/2}) 4\pi (X^{n+1/2})^2 = 0. \quad (8.49)$$

Pour estimer la densité des gaz frais entre deux pas de temps, l'hypothèse :

$$\rho^{n+1/2} = \frac{\rho^{n+1} + \rho^n}{2} \quad (8.50)$$

est introduite. L'équation 8.49 se développe alors sous la forme :

$$\frac{4\pi}{3\Delta t} \left[(R_0^3 - (X^{n+1})^3) \rho^{n+1} - (R_0^3 - (X^n)^3) \rho^n \right] - \frac{\rho^{n+1} + \rho^n}{2} (U^{n+1/2} - \dot{X}^{n+1/2}) 4\pi \left(\frac{X^{n+1} + X^n}{2} \right)^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow \rho^{n+1} \left[\frac{R_0^3 - (X^{n+1})^3}{3\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{X^{n+1} + X^n}{2} \right)^2 \left(U^{n+1/2} - \frac{X^{n+1} - X^n}{\Delta t} \right) \right] - \rho^n \left[\frac{R_0^3 - (X^n)^3}{3\Delta t} + \frac{1}{2} \left(\frac{X^{n+1} + X^n}{2} \right)^2 \left(U^{n+1/2} - \frac{X^{n+1} - X^n}{\Delta t} \right) \right] = 0.$$

Au final, la masse volumique des gaz frais s'exprime à partir des paramètres d'évolution sur un volume de contrôle arbitraire par :

$$\rho^{n+1} = \rho^n \frac{\left[\frac{R_0^3 - (X^n)^3}{3\Delta t} + \frac{1}{2} \left(\frac{X^{n+1} + X^n}{2} \right)^2 \left(U^{n+1/2} - \frac{X^{n+1} - X^n}{\Delta t} \right) \right]}{\left[\frac{R_0^3 - (X^{n+1})^3}{3\Delta t} - \frac{1}{2} \left(\frac{X^{n+1} + X^n}{2} \right)^2 \left(U^{n+1/2} - \frac{X^{n+1} - X^n}{\Delta t} \right) \right]}. \quad (8.51)$$

8.3.2 Validation numérique de l'équation

L'équation d'évolution de la masse volumique des gaz frais ρ_u qui vient d'être développée est une équation discrétisée en temps. Afin de valider cette expression, la figure 8.9 compare à partir de simulations numériques DNS 3D YALES2 pour deux mélanges différents la densité ρ_u extraite des simulations à chaque pas de temps et celle calculée à l'aide de l'équation 8.51. Les résultats qui sont présentés dans cette figure ont été extraits des simulations pour un intervalle de temps physique régulier comparable à la fréquence d'acquisition de 5 kHz du dispositif expérimental qu'elles reproduisent (cf Chap. 6). Ils démontrent la capacité de cette équation à déterminer la

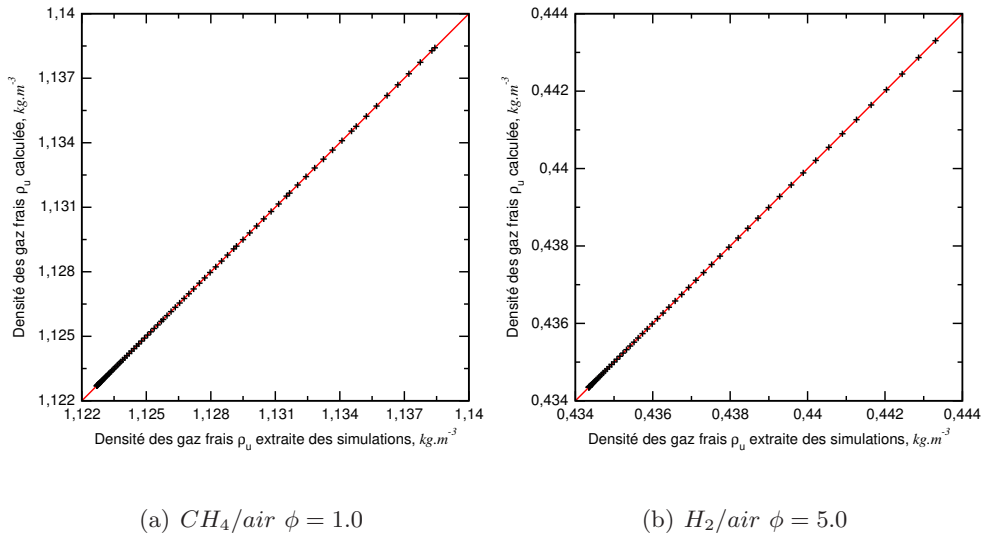


FIGURE 8.9 – Validation des équations de détermination de ρ_u (Eq. 8.51) à partir de simulations YALES2 3D.

densité instantanée des gaz frais pendant la propagation du front de flamme. De plus, la fréquence

d'acquisition du dispositif expérimental apparaît comme suffisante pour déterminer l'évolution temporelle de la densité dans cette gamme de faible augmentation, correspondant pour ces deux mélanges combustibles à des flammes atteignant un rayon de 2 *cm*. Cette équation est donc valide mais nécessite de pouvoir mesurer avec précision les trois paramètres qui la compose (cf Fig. 8.8) :

- X : la position dans les gaz frais de l'interface du volume de contrôle $V_a(t)$
- \dot{X} : la vitesse de propagation absolue, i.e. dans un repère fixe, de cette interface
- U : la vitesse des gaz frais à la position X .

8.3.3 Application sur des données expérimentales

Les sections précédentes viennent de démontrer que la mesure de la densité instantanée des gaz frais pouvait être accessible expérimentalement à condition de déterminer avec suffisamment de précision les variables qui l'expriment. La figure 8.10 présente le mode de traitement des données mis en place pour la détermination de l'ensemble de ces données nécessaires à l'évaluation de la vitesse de consommation (Eq. 8.41). Ce traitement est utilisé aussi bien sur des données numériques qu'expérimentales. Il s'opère de la manière :

1. les trois vecteurs : position R_{flamme} , X et vitesse U_x , sont déterminés sur l'intégralité du temps de mesure.
2. puis, la masse volumique est déterminée pour un pas de temps donné (flèches vertes). Les variables qui ne sont pas nécessaires à l'obtention des résultats au temps i sont colorées en gris.
3. Enfin les dérivées temporelles du rayon de flamme et de masse volumique sont calculées comme des dérivées centrées d'ordre un (flèches rouges et bleues).

Pour le traitement expérimental des images de tomographie laser, la position X est définie à partir de la position du front de flamme telle que :

$$X = R_{tomo} + d, \tag{8.52}$$

avec d une distance constante en pixel définie par l'utilisateur entre 50 et 100 *pixels* devant le front de flamme. La vitesse en cette position X est déterminée depuis le traitement PIV des mêmes images. Le profil de vitesse des gaz frais est croissant devant le front de flamme jusqu'à atteindre un maximum à l'entrée du front de flamme u_g . Puisque cette vitesse n'est pas la même en fonction de la distance d au front de flamme, la précision de sa mesure peut

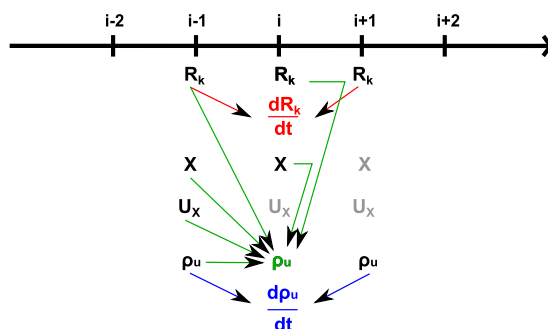


FIGURE 8.10 – Schéma du mode de calcul pour déterminer le terme de compression dans les gaz frais $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$.

aussi être différente. En effet la précision de mesure est liée à l'identification du déplacement des gaz frais dont l'incertitude dépend de la résolution des images. Plus la vitesse est grande, plus l'incertitude liée au déplacement identifié en pixel sur les images diminue. Pour évaluer cet impact, la figure 8.11 présente la détermination du terme complet $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ pour trois positions devant le front de flamme exprimée en pixel. Sur les images de tomographie utilisées pour ce traitement, une distance de 70 à 90 *pixels* correspond à une distance physique de l'ordre de 3.2 à 4.2 *mm* en amont du front de flamme. Les résultats illustrés sur ces figures montrent que la

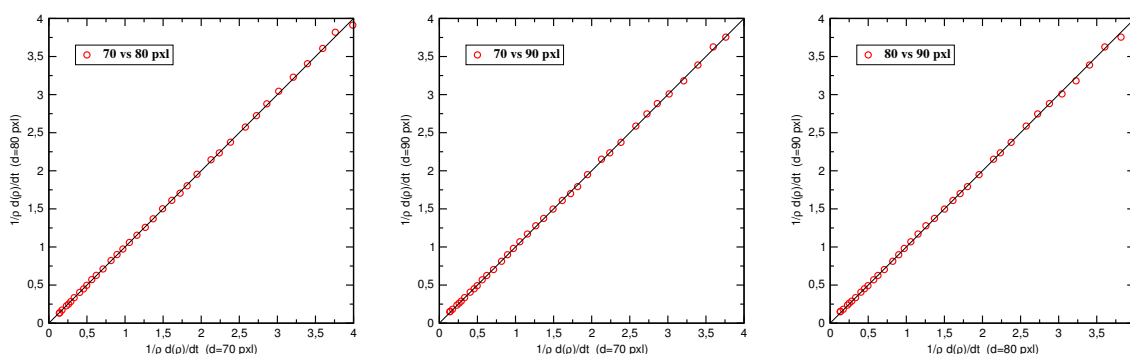


FIGURE 8.11 – Influence de la distance au front de flamme d sur la détermination du terme $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

distance au front de flamme ne modifie pas la mesure du terme $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$. Ainsi, les trois volumes de contrôle, définis par ces trois différentes distances, permettent de déterminer une même valeur de ce terme. Donc la détermination du terme de compression dans l'équation de la vitesse de combustion est possible et robuste.

Pour accentuer la robustesse de cette méthode et du traitement associé, la figure 8.12 présente l'évolution du terme de compression $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ déterminé à partir d'une simulation à laquelle est superposée ce même terme issu du traitement de cinq différents essais expérimentaux. Elle

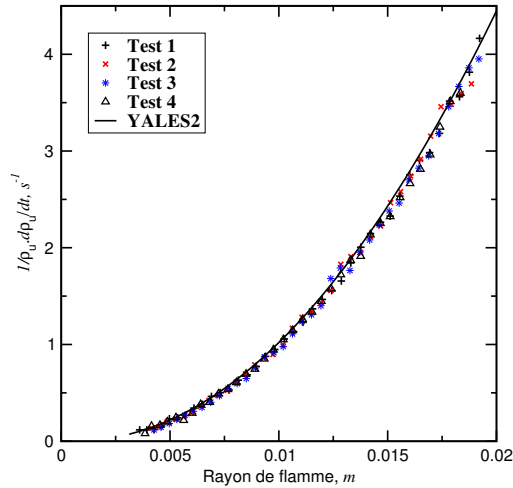


FIGURE 8.12 – Répétabilité des mesures et comparaison exp/num du terme $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

démontre à la fois la parfaite répétabilité des mesures en comparant les résultats expérimentaux entre eux. Mais aussi le très bon accord entre la simulation DNS et l'expérience sur le calcul du terme de compression.

8.4 Détermination expérimentale de la vitesse de consommation

Les sections précédentes ont démontré qu'il était possible de mesurer la densité instantanée des gaz frais pendant la propagation du front de flamme pour estimer le terme de compression des gaz frais $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$. De plus, il a été démontré qu'en première approximation, les deux rayons équivalents définis théoriquement dans l'Eq. 8.41 pouvaient être remplacés par un seul, défini comme la position de l'isotherme d'évaporation des traceurs utilisés en tomographie laser à $T_{evap} = 570 K$. Dans le but de valider cette approximation et de démontrer la faisabilité de la mesure de la vitesse de consommation, cette section présente la comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques des DNS *YALES2* pour différents carburants et différentes conditions thermodynamiques.

8.4.1 Détermination expérimentale du terme de compression à l'aide du signal de pression

Dans les travaux numériques de *Bonhomme et al.* [82], il a été proposé d'utiliser la mesure du rayon de flamme et du signal de pression pour déterminer la vitesse de consommation du réactif limitant dans une enceinte fermée S_c . Cette méthode y est définie comme un bon candidat pour mesurer expérimentalement la vitesse de combustion car elle ne nécessite pas la détermination complexe de l'évolution temporelle de la masse volumique des gaz frais, mais simplement le signal temporel de pression. L'introduction de l'hypothèse d'une compression isentropique des gaz frais, déjà présentée au Chap. 3, redéfinit le terme de compression par :

$$\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt} = \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt},$$

pour exprimer la vitesse de consommation du réactif limitant moyennée spatialement par :

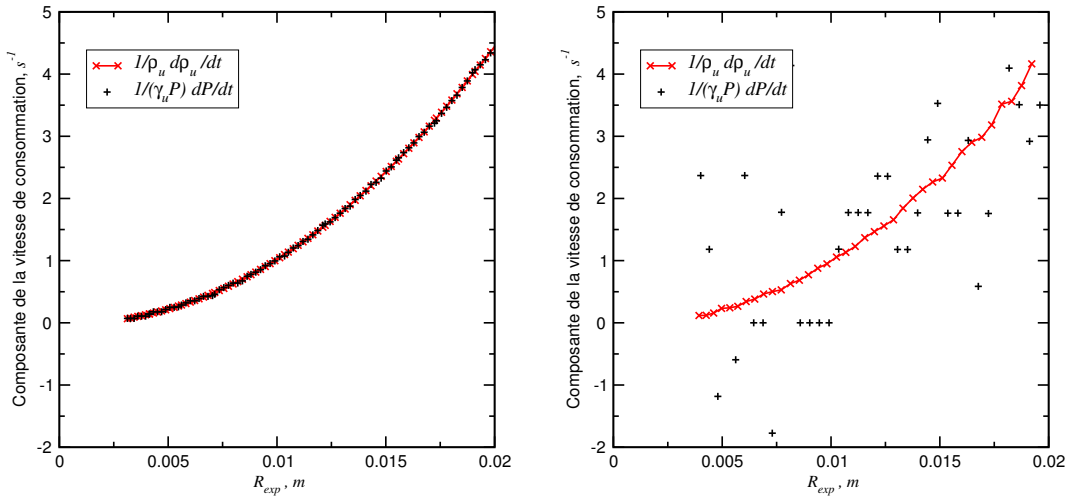
$$\langle S_{c,r} \rangle_{Confined} = \frac{dR_r}{dt} - \frac{R_0^3 - R_r^3}{3R_r^2} \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}.$$

L'étude qui précède dans ce chapitre a démontré que l'utilisation d'un seul rayon, noté R_r dans cette dernière équation était valide. Dès lors, si l'hypothèse d'isentropie et la précision de la mesure du signal de pression ainsi que l'estimation de sa dérivée temporelle sont équivalentes à celles de la masse volumique des gaz frais et sa dérivée qui viennent d'être validées, alors cette expression se présente en effet comme un bon candidat pour déterminer la vitesse de consommation puisqu'elle ne nécessite pas l'introduction de particules traceurs comme pour la technique précédente utilisant des images de tomographie laser. En effet, le rayon de flamme et la pression interne au sein de la chambre peuvent être mesurés par des méthodes totalement non intrusives.

Afin d'étudier et de mettre en évidence les capacités à la fois de cette équation et des dispositifs expérimentaux utilisés pour la mesure, la figure 8.13 présente les termes $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ et $\frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}$ calculés à partir de résultats numériques (a) et expérimentaux (b) d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

Les résultats numériques démontrent que les deux termes exprimant la compression des gaz frais $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ et $\frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}$ sont superposés. Ainsi, ils prouvent que l'hypothèse d'une compression isentropique est valide pour ce mélange et confirment les observations faites dans [82].

Cependant, les résultats expérimentaux démontrent que la précision des mesures utilisant le signal de pression n'est pas suffisante dans notre cas. La seconde figure démontre que même s'il



(a) Simulation YALES2

(b) Résultats expérimentaux

FIGURE 8.13 – Comparaison des termes $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ et $\frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}$ en fonction du rayon de flamme, pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

est possible d'identifier une même tendance pour les deux termes, l'expression $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ suit une évolution monotone avec le temps alors que le terme utilisant le signal de pression se présente sous la forme d'un nuage de points affecté par la dynamique du capteur de pression. La capacité actuelle des capteurs de pression ne semble donc pas suffisante pour pouvoir mesurer la vitesse de consommation dans cette plage où le développement de la flamme n'excède pas $R_f = 2.5\text{cm}$, soit une élévation de pression inférieure à 3 %.

Il faut noter que cette expression est utilisée avec des résultats expérimentaux dans les récents travaux de *Xiouris et al.* [45]. Leurs mesures sont effectuées sur une plage de données où l'élévation de pression respecte le critère $\frac{P}{P(t=0)} > 2.5$ dans une cellule de mesure parfaitement sphérique, fermée et sans accès optique d'un diamètre interne $d_0 = 203.2\text{ mm}$. Mais alors le front de flamme n'est plus nécessairement laminaire et peut comporter de nombreux plissements. Les étirements locaux du front de flamme réel ne seront donc pas pris en compte en considérant un contour laminaire. La définition d'un rayon équivalent à partir du signal de pression proposé dans cette étude peut donc introduire un biais non négligeable.

8.4.2 Superposition de résultats numériques et expérimentaux

La figure 8.14 présente superposées sur un même graphique les vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c mesurées sur le dispositif expérimental du CORIA et simulées par une DNS réalisée par YALES2 sur un domaine reproduisant l'expérience. Elles sont représentées pour trois différentes richesses d'une flamme stoechiométrique de CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression. Tous ces graphiques démontrent un très bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux.

Pour les trois richesses présentées, les valeurs étirées de chacune de ces deux vitesses sont très proches. Ce résultat est prévisible car les prémélanges CH_4/air présentent un nombre de Lewis proche de l'unité et les gaz brûlés atteignent l'état d'équilibre thermodynamique rapidement [165]. Ainsi, la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$, faisant l'hypothèse sur l'état des gaz brûlés : $\rho_b = \rho_b^{eq}$ valide dans ce cas (cf. Chap. 3), est similaire à la vitesse de consommation pour ce mélange combustible.

L'analyse des résultats numériques sur la figure 8.14 montre que la valeur extrapolée de la vitesse S_c est plus proche de la vitesse S_l^0 estimée à partir d'une simulation 1D que celle de la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$. La vitesse de consommation semble donc plus précise pour l'estimation de la vitesse de combustion laminaire S_l^0 . Néanmoins, l'analyse des résultats expérimentaux démontre que l'utilisation de la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ est plus fiable car elle définit en fonction de l'étirement une courbe de points peu dispersés comparée à la vitesse S_c qui définit un nuage de points dans la même gamme d'étirement. Ainsi pour des prémélanges où les hypothèses reliant la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ à la S_l^0 sont valides, la mesure expérimentale de la vitesse S_c n'est pas nécessaire car elle n'apportera pas une précision supplémentaire aux mesures. Cependant, de nombreux mélanges combustibles ne respectent pas ces hypothèses. Notamment lorsque la valeur du nombre de Lewis est largement différente de 1. A titre d'exemple, des mélanges pauvres H_2/air présentent des nombres de Lewis inférieurs à 0.4 et des mélanges C_8H_{18}/air présentent des nombres de Lewis supérieurs à 1.6. C'est sur ce type de mélange que l'utilisation de la vitesse S_c peut permettre une mesure plus précise de la vitesse de combustion laminaire.

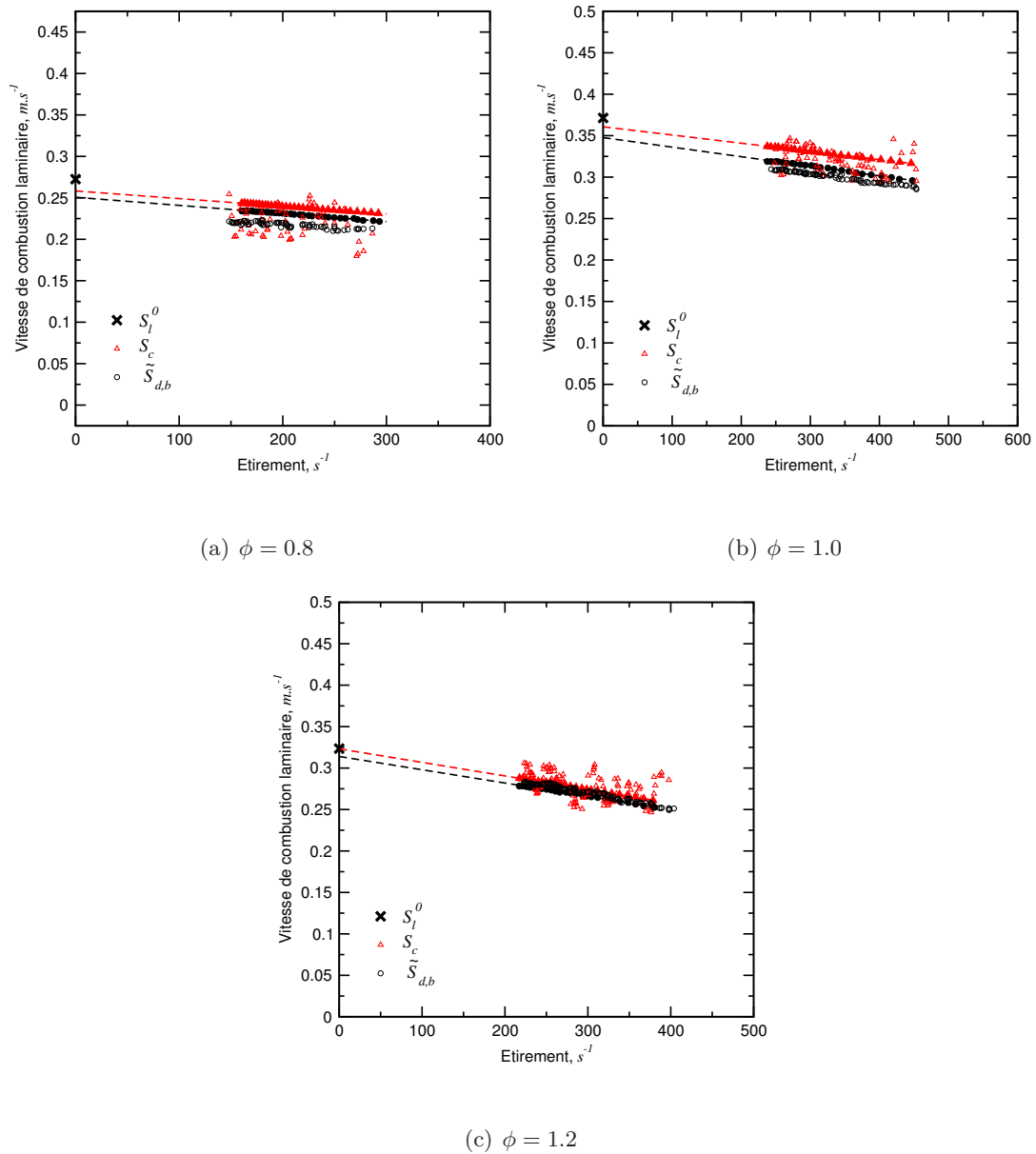


FIGURE 8.14 – Comparaison entre les résultats numériques (symboles pleins) et expérimentaux (symboles creux) de la vitesse de consommation de flammes CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

8.4.3 Résultats expérimentaux sur des mélanges au nombre de Lewis différent de 1

La figure 8.15 représente les résultats expérimentaux et leur extrapolation linéaire, représentée par une droite en pointillés, des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c , respectivement pour une flamme H_2/air à la richesse $\phi = 0.5$ et une flamme C_3H_8/air à la richesse $\phi = 1.0$ aux conditions atmosphériques

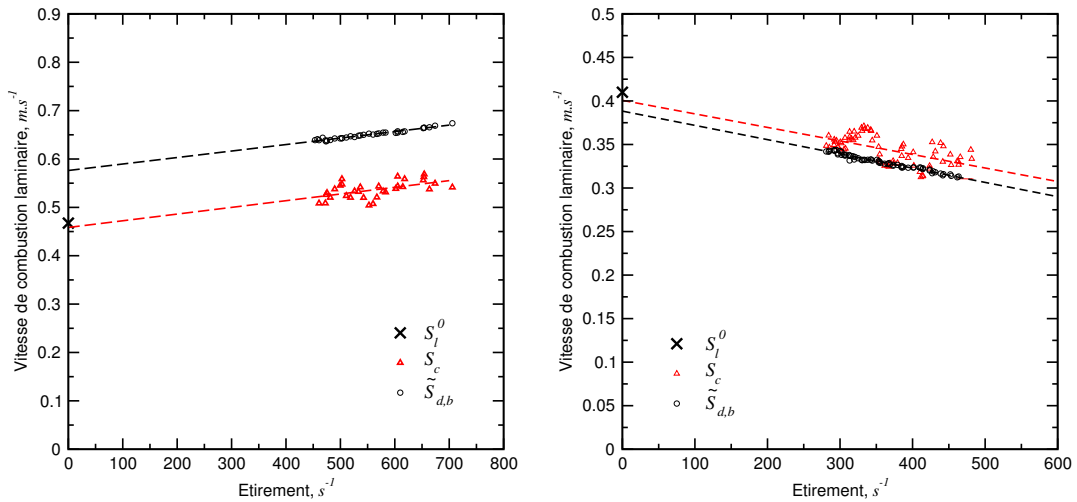
de température et de pression. Ainsi qu'une flamme stoechiométrique C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$. Les intervalles de rayons de flamme exploités pour réaliser l'extrapolation à étirement nul ont été sélectionnés pour négliger toutes perturbations extérieures, i.e. l'intervalle classique $1 < R_f < 2 cm$. Pour la flamme H_2/air , le rayon maximal est diminué en fonction des recommandations de *Varea et al.* [44] qui définissent l'apparition de plissement sur la surface de flamme du mélange hydrogène-air dans les mêmes conditions thermodynamiques et de richesse à $R_f = 14 mm$.

Pour ces trois mélanges combustibles, les vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c exhibent un comportement et/ou une valeur différente avec l'étirement sur les intervalles observés, tels que :

- pour la flamme pauvre H_2/air , caractérisée par un nombre de Lewis inférieur à 1, la valeur extrapolée de la vitesse S_c est proche de la valeur estimée par un calcul numérique 1D de S_l^0 . Cependant, les deux vitesses définissent des longueurs de Markstein similaires. Ainsi, la comportement de ces deux vitesses en fonction de l'étirement est similaire mais l'expression de la vitesse de consommation permet de corriger la valeur de la densité des gaz brûlés ρ_b qui n'est pas celle de l'équilibre chimique adiabatique utilisée dans l'expression de la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$.
- pour la flamme stoechiométrique C_3H_8/air , caractérisée par un nombre de Lewis de 1.5, le comportement de ces vitesses est comparable à celui de la flamme H_2/air .
- pour la flamme stoechiométrique C_8H_{18}/air , caractérisée par un nombre de Lewis de 2.1 (largement supérieur à 1), le comportement est opposé aux observations faites pour les deux précédents mélanges. Les deux vitesses tendent par extrapolation à étirement nul vers une valeur similaire de la vitesse de combustion laminaire S_l^0 , mais elles montrent un comportement en fonction de l'étirement différent. La vitesse S_c est moins impactée par l'étirement du front de flamme que la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ puisque sa longueur de Markstein se rapproche de zéro, i.e. $\frac{S_c}{S_l^0}$ reste proche de 1.

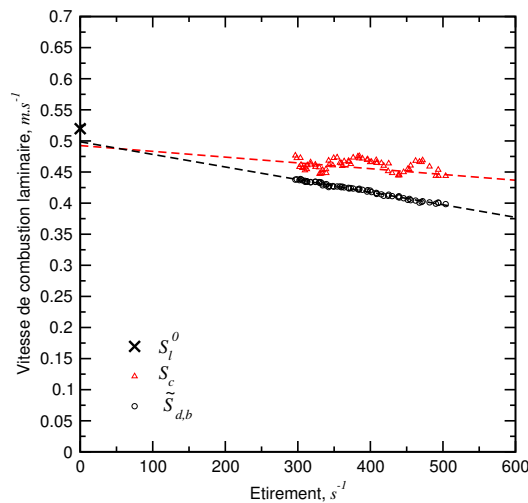
Pour illustrer ces observations, le tableau 8.1 répertorie le nombre de Lewis et les longueurs de Markstein $\ell_{d,b}$ et ℓ_c de ces trois flammes. A noter que les signes des longueurs de Markstein sont accords avec les résultats de la théorie hydrodynamique présentés dans la tableau 3.1 au chapitre 3, tels que pour un nombre de Lewis inférieur à ~ 1 la longueur de Markstein est négative (flamme H_2/air) et positive dans le cas contraire (flamme C_3H_8/air et C_8H_{18}/air).

Pour analyser plus en détail le comportement de la flamme d'iso-octane, la figure 8.16 présente pour trois richesses les vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c en fonction de l'étirement et leur extrapolation



(a) H_2/air $\phi = 0.5$ $T = 298 \pm 2 K$

(b) C_3H_8/air $\phi = 1$ $T = 298 \pm 2 K$



(c) C_8H_{18}/air $\phi = 1$ $T = 373 \pm 2 K$

FIGURE 8.15 – Superposition des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c avec leurs extrapolations linéaires respectives pour différents mélanges initiés à la pression atmosphérique.

linéaire respective de ce mélange C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$. Les valeurs des vitesses à étirement nul et les longueurs de Markstein sont répertoriées dans le tableau 8.2 qui fait la synthèse des résultats

Les résultats présentés dans la figure 8.16 et le tableau 8.2 montrent que la différence de comportement avec l'étirement du front de flamme entre ces deux vitesses n'est pas la même en fonction de la richesse. Les deux longueurs de Markstein sont même de signes opposés pour

Carburant	H_2	C_3H_8	C_8H_{18}
ϕ	0.5	1.0	1.0
Le	0.506	1.529	2.124
$\ell_{d,b}, mm$	-0.134	0.164	0.204
ℓ_c, mm	-0.138	0.184	0.093

TABLE 8.1 – Nombre de Lewis et Longueur de Markstein associés aux mélanges présentés dans la figure 8.15.

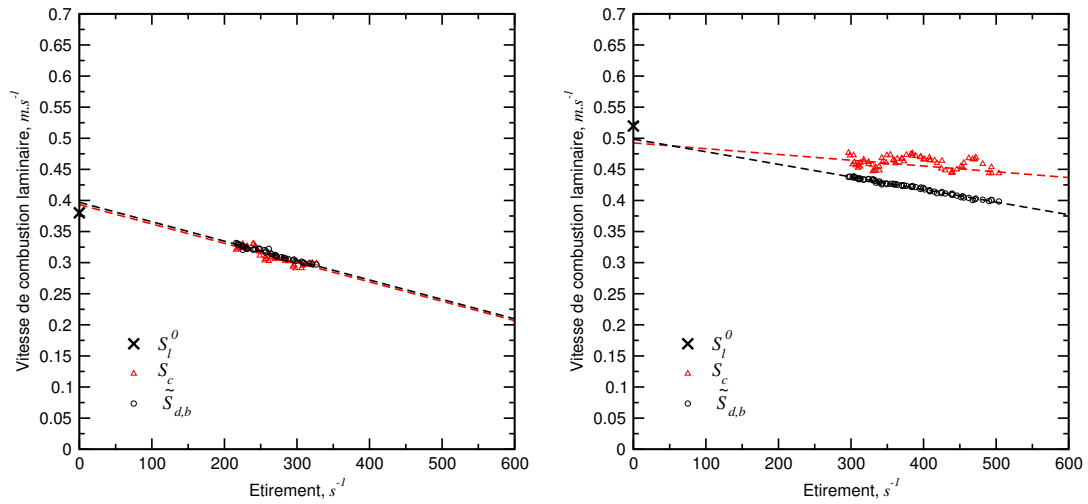
ϕ	0.8	0.9	1.0	1.3
$\tilde{S}_{d,b}^0, cm.s^{-1}$	39.32	46.39	49.91	37.62
$S_c^0, cm.s^{-1}$	39.70	48.73	49.25	37.98
$\ell_{d,b}, mm$	0.312	0.255	0.204	0.002
ℓ_c, mm	0.311	0.209	0.093	-0.052
$\frac{ \ell_c - \ell_{d,b} }{\ell_{d,b}}, \%$	0.32	18.0	54.4	2700

TABLE 8.2 – Résultats pour plusieurs richesses de l'extrapolation à étirement nul des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c et leurs longueurs de Markstein respectives pour un mélange C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$.

la richesse $\phi = 1.3$. Cette différence est clairement illustrée sur la figure 8.17 qui représente l'évolution en fonction de la richesse des longueurs de Markstein associées à chacune de ces vitesses. Cette figure montre que la longueur de Markstein $\ell_{d,b}$ est égale pour la richesse $\phi = 0.8$ à celle de la vitesse de consommation ℓ_c , puis elle devient supérieure pour des mélanges plus riches. Ces résultats montrent que l'expression $\tilde{S}_{d,b}$ ne représente pas nécessairement la sensibilité de la vitesse de consommation de flamme à l'étirement.

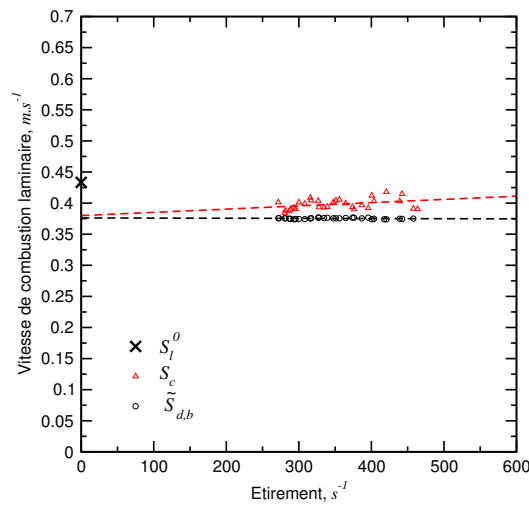
L'ensemble des résultats présentés sur différents mélanges et richesses montrent que définir la vitesse de combustion laminaire à partir de la vitesse de déplacement normalisée par le rapport de densité $\tilde{S}_{d,b}$ n'est pas la méthode la plus adaptée. Elle peut selon les mélanges donner une estimation de la longueur de Markstein similaire à S_c mais définir une vitesse à étirement nul plus éloignée de S_l^0 que S_c^0 . Ou bien donner une valeur similaire de vitesse à étirement nul mais une information différente sur la sensibilité à l'étirement.

Au contraire, la mesure de la vitesse de consommation par l'Eq. 8.41 permet d'exprimer la vitesse de combustion laminaire en se soustrayant à l'évaluation du facteur d'expansion $\sigma = \frac{\rho_b}{\rho_u}$



(a) $\phi = 0.8$

(b) $\phi = 1.0$



(c) $\phi = 1.3$

FIGURE 8.16 – Superposition des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c avec leurs extrapolations linéaires respectives pour plusieurs richesses d'un mélanges C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$.

nécessaire dans l'expression de $\tilde{S}_{d,b}$ (Eq. 3.16) et qui reste problématique lorsqu'il est calculé à l'équilibre chimique adiabatique. De plus, cette vitesse est directement liée au taux de réaction de l'espèce réactive minoritaire. Elle présente donc un fort intérêt pour la validation de schéma cinétique.

Il reste néanmoins deux problématiques à noter sur les observations présentées ici :

- Les résultats sur la flamme hydrogène-air ne sont valides que dans la limite où l'ense-

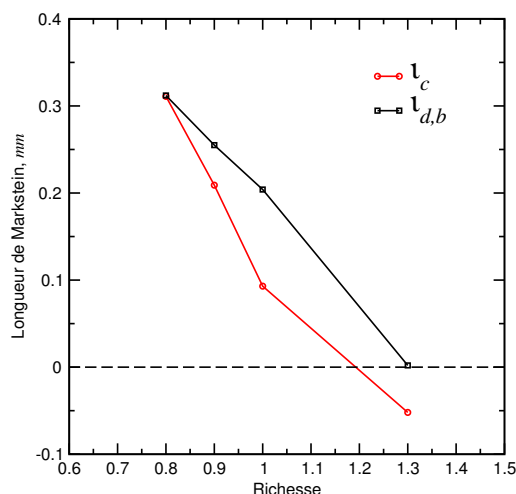


FIGURE 8.17 – Evolution en fonction de la richesse de la longueur de Markstein d’une flamme C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$.

mencement ne perturbe pas la propagation de la flamme. En effet, même si au cours de nos études aucun impact n’a pu être identifié dans cet intervalle de rayons où la flamme est peu développée ($R_f < 14 mm$), l’ensemencement en gouttelettes d’huile représente l’introduction d’une source d’espèces carbonées dans le milieu réactionnel qu’il n’y aurait pas dans un simple mélange $H_2/(O_2 + N_2)$.

- Des simulations DNS de ces différentes flammes devraient être réalisées pour permettre de valider ces observations, une analyse plus complète et statuer du comportement de ces vitesses pour des étirements plus faibles. Dans ce chapitre, l’ensemble des résultats présentés repose sur l’extrapolation linéaire du nuage de points qui peut être soumise à de fortes incertitudes.

8.5 Conclusion sur la mesure de la vitesse de consommation

Le tableau 8.3 récapitule l’ensemble des définitions de la vitesse de consommation qui viennent d’être présentées pour la géométrie de flamme sphérique.

Parmi toutes les équations qui ont été définies, une seule est exploitable expérimentalement avec un degré de précision suffisant : l’Eq. 8.41. Elle permet de mesurer la vitesse de consommation moyennée spatialement de l’espèce réactive minoritaire. Pour toutes les autres espèces, réactif majoritaire ou produites, leur vitesse de consommation est accessible uniquement

Symbole	Expression	Définition	Accessibilité
$\langle S_{c,k} \rangle$	$\frac{1}{\rho_u [Y_k^b - Y_k^u]} \int_0^{R_0} \omega_k r^2 dr$	Définition théorique de la vitesse de consommation de l'espèce k	Num
$\langle S_{c,k} \rangle_{Unconfined}$	$S_f \frac{\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} + \frac{Y_{k,u}}{(Y_{k,b} - Y_{k,u})} u_{R_f,eq}$	Expression pour l'espèce k en domaine ouvert	Num
$\langle S_{c,DRS} \rangle_{Unconfined}$	$S_f - u_{R_f,eq}$	Expression pour l'espèce réactive minoritaire (DRS) en domaine ouvert	Num
$\langle S_{c,k} \rangle_{Confined}$	$S_f \frac{(\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u})}{\rho_u (Y_{k,b} - Y_{k,u})} + \frac{\rho_u Y_{k,u} R_0^3 + (\rho_b Y_{k,b} - \rho_u Y_{k,u}) R_{f,eq}^3}{3\rho_u (Y_{f,b} - Y_{f,u}) R_{f,eq}^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$	Expression pour l'espèce k en domaine fermée	Num
$\langle S_{c,DRS} \rangle_{Confined}$	$\frac{dR_f}{dt} - \frac{(R_0^3 - R_f^3)}{3R_f^2} \frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$	Expression pour l'espèce réactive minoritaire (DRS) en domaine fermé avec $\rho_u(t)$	Num + Exp
$\langle S_{c,DRS} \rangle_{Confined}$	$\frac{dR_f}{dt} - \frac{R_0^3 - R_f^3}{3R_f^2} \frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}$	Expression pour l'espèce réactive minoritaire (DRS) en domaine fermé avec $P(t)$	Num (+ Exp?)

TABLE 8.3 – Tableau récapitulatif des différentes expressions de la vitesse de consommation pour la configuration de flamme en expansion sphérique et de leur accessibilité : numérique (Num) et expérimentale (Exp).

numériquement car les termes liés aux gaz brûlés : ρ_b et $Y_{k,b}$ doivent être connus.

La technique de mesure directe de la vitesse de consommation proposée dans cette étude démontre un fort potentiel pour caractériser les flammes de prémélange. Mais il reste des étapes à finaliser pour démontrer son caractère universel quels que soient le mélange ou les conditions thermiques et évaluer ses limites.

Il faut noter pour conclure que même à partir de résultats numériques, l'estimation de la vitesse de consommation peut être problématique. En effet, les termes ρ_b et $Y_{k,b}$ sont d'après les équations développées précédemment des valeurs moyennes constantes qui caractérisent l'état de ces paramètres dans les gaz brûlés. Or pour des espèces ou des conditions thermodynamiques plus complexes, l'évolution spatiale des profils de ces paramètres, et notamment de $Y_{k,b}$, à travers les gaz brûlés et leur influence sur le front de flamme et ses propriétés ne sont pas représentés par des valeurs moyennes et l'utilisation de leurs valeurs à l'équilibre chimique adiabatique renvoie au

cas asymptotique lorsque la flamme est développée. Dès lors, ces équations nécessitent d'utiliser des espèces dont les profils évoluent peu dans les gaz brûlés pour conserver une bonne précision.

8.6 Bilan des équations expérimentalement exploitables pour mesurer la vitesse de combustion laminaire

Au final, les travaux présentés jusqu'à ce point permettent de conclure que la définition de la vitesse de combustion laminaire peut être abordée par deux approches distinctes. Une approche cinématique liée à la vitesse du fluide et une autre cinétique liée à la réaction chimique de combustion. Chacune de ces approches peut être développée pour aboutir à une ou plusieurs équations exprimées avec des paramètres dynamiques mesurables. Elles sont associées à des longueurs de Makstein qui leur sont propres.

1. Définition à partir de paramètres locaux de la vitesse de combustion laminaire

Cette approche, clairement exposée au chapitre 3, repose sur le lien entre la vitesse de déplacement des gaz frais par rapport à une iso-surface donnée dans le front de flamme et la vitesse de combustion laminaire. Récemment, *Giannakopoulos et al.* [21] ont mis clairement en évidence la dépendance de cette vitesse de déplacement en fonction de l'iso-surface considérée dans le front de flamme. La définition de l'isotherme de référence est donc de première importance pour cette approche.

D'un point de vue expérimental, deux définitions, liées à deux iso-surfaces distinctes, sont exploitables pour mesurer la vitesse de combustion étirée par cette approche. Ces vitesses sont définies :

- (a) sur l'iso-surface séparant le front de flamme des gaz frais. Il s'agit de l'Eq. 3.17 qui s'exprime uniquement avec des paramètres dynamiques mesurables :

$$\tilde{S}_{d,u} = (S_f - u_g).$$

Mais, cette vitesse, qui est par définition une différence entre deux grands nombres, est sujette à des incertitudes de mesure conséquentes sur l'estimation finale de la vitesse de combustion laminaire. De plus, elle nécessite la mise en place d'une technique de mesure optique et d'un post-traitement spécifique.

(b) sur l'iso-surface séparant le front de flamme des gaz brûlés. Il s'agit de l'Eq. 3.16 qui s'exprime avec des paramètres mesurables et le facteur d'expansion $\sigma = \frac{\rho_b}{\rho_u}$. Ce facteur prend en compte le saut de densité au passage du front de flamme et est généralement exprimé en négligeant l'augmentation de pression dans une cellule de mesure close à volume constant. Il est calculé à l'aide de solveurs d'équilibre chimique du mélange étudié pour l'exploitation des mesures. La vitesse ainsi définie est :

$$\tilde{S}_{d,b} = \frac{\rho_b^{eq}}{\rho_u(t=0)} S_f.$$

Ainsi, même si l'incertitude de mesure de la vitesse de propagation S_f est inférieure à celle de la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$, l'hypothèse dans la définition de l'équation utilisée peut introduire une plus grande incertitude sur la valeur finale.

Pour ces deux vitesses, les longueurs de Markstein associées, définissant la sensibilité de la flamme à l'étirement, sont différentes et leur sont propres. De plus, exception faite des mélanges H_2/air , ces longueurs de Markstein sont de signe opposé.

2. Définition cinétique de la vitesse de combustion laminaire

Cette approche développée en détail dans ce chapitre permet d'évaluer la vitesse de consommation d'une espèce comprise dans l'équation bilan de la réaction de combustion, i.e. un réactif ou un produit. Expérimentalement, seule la définition utilisant l'espèce réactive minoritaire est exploitable de manière directe. C'est-à-dire ne nécessitant pas la détermination de paramètres tels ρ_b ou encore une fraction massique dans les gaz brûlés, qui ne sont pas accessibles par les différentes techniques de mesure mises en place au cours de ces travaux de thèse.

La définition de la vitesse de consommation se base sur l'expression de l'intégrale du terme source dans la configuration de flammes sphériques à partir de paramètres dynamiques pouvant être mesurés directement, ou dont l'approximation est justifiée comme pour les rayons équivalents R_{eq} et $R_{eq,2}$. En effet, l'introduction d'un ou deux rayons équivalents, construits depuis le flux, i.e. l'évolution de la masse d'une espèce, est nécessaire. Ils sont fonctions de l'espèce considérée mais définissent des iso-surfaces contenues dans le front de flamme proches l'une de l'autre.

Enfin, il faut noter que la définition d'une vitesse de consommation depuis l'expression de cette intégrale dans une configuration expérimentale de flamme sphérique impose de représenter la flamme par une seule interface. C'est pourquoi au final il a été choisi de

définir la position de celle-ci comme localisée en R_{eq} . Ce choix permet de simplifier notablement l'équation de la vitesse de consommation, Eq. 8.22 pour un domaine sphérique ouvert et Eq. 8.40 pour un domaine sphérique fermé, et définit de manière explicite le rayon de flamme utilisé.

L'exploitation expérimentale de cette définition est rendue possible par le développement qui vient d'être proposé sur un volume de contrôle variable. La mesure du champs de vitesse radiale dans les gaz frais permet l'estimation de la densité des gaz frais et son évolution temporelle. Elle permet avec la mesure des paramètres dynamiques de flamme (son rayon et sa vitesse de propagation absolue) de déterminer directement la vitesse de consommation de l'espèce réactive minoritaire.

En conclusion, les définitions de la vitesse de combustion laminaire à partir de la configuration de flammes en expansion sphériques sont multiples et complexes. Elles se définissent tout d'abord par un type d'approche de cette vitesse, par des paramètres cinématique ou cinétique. Selon cette sélection, différentes approximations et hypothèses peuvent être introduites pour pouvoir l'exprimer à partir de variables mesurables expérimentalement. Le schéma 8.18 synthétise les différentes définitions de la vitesse de combustion laminaire depuis la configuration idéale 1D à des flammes en expansion sphériques réelles 3D. L'arborescence illustre le développement allant jusqu'aux expressions mesurables dans notre étude à la fin de chaque branche.

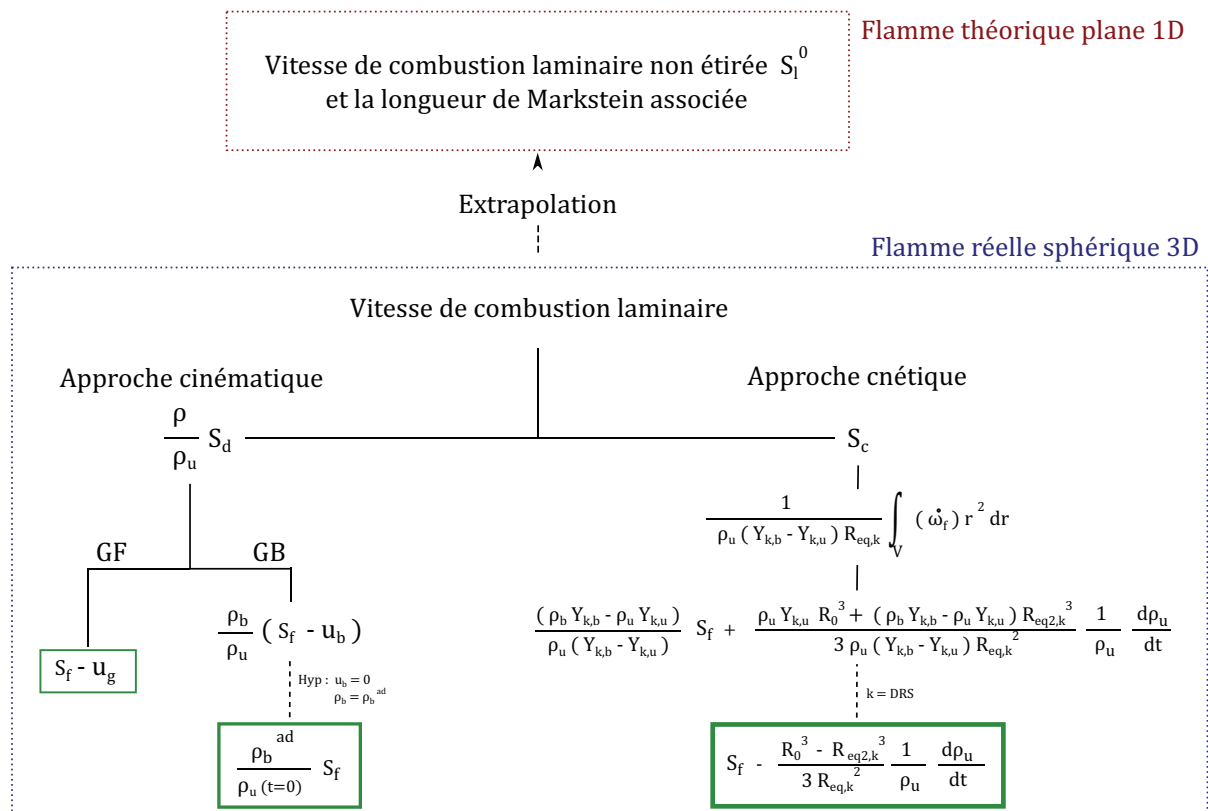


FIGURE 8.18 – Schéma des équations liées à la vitesse de combustion laminaire non étirée S_l^0 et définissant une longueur de Markstein propre à chacune.

Chapitre 9

Analyse de différents biais impactant la détermination de la vitesse de combustion laminaire

Ce chapitre présente l'analyse de différents biais identifiés comme impactant la détermination de la vitesse de combustion laminaire et complète les travaux collaboratifs présentés au Chap. 7. Dans un premier temps, les effets des transferts radiatifs d'énergie thermique sur les mesures sont étudiés. Ils peuvent notamment fortement impacter les mesures effectuées sur les nouveaux combustibles et procédés de combustion qui introduisent dans les gaz frais une grande quantité d'espèces rayonnant dans la même gamme de fréquence que les gaz brûlés, i.e. des mélanges possédant des propriétés de re-absorption de l'émission radiative des gaz brûlés. Une seconde section présente une étude sur l'analyse des impacts de la diffusion différentielle / préférentielle sur les vitesses caractéristiques de flamme et leur détermination. Ces effets sont importants pour les flammes comportant des espèces très diffusives comme les flammes d'hydrogène (H_2/air). Enfin, une troisième section est dédiée à l'impact des modèles d'extrapolation à étirement nul des vitesses mesurées pour l'estimation de la LBV, S_L^0 . Il sera vu qu'ils ont un impact non négligeable. Une approche pour se soustraire de ces modèles et opérer la validation précise de schéma cinétique sera proposée.

Sommaire

9.1	Les effets des échanges radiatifs d'énergie thermique	195
9.1.1	Choix du mélange	195
9.1.2	Analyse sur les vitesses de flamme extrapolées à étirement nul	196
9.1.3	Mesure de profils ponctuels temporels de température	202
9.1.4	Conclusion	207
9.2	Les effets de diffusion différentielle	210
9.2.1	Le mélange étudié	212
9.2.2	Résultats à pression atmosphérique	213
9.2.3	Perspectives de résultats pour des conditions sub-atmosphériques	219
9.2.4	Conclusion	220
9.3	Analyse des modèles d'extrapolation à étirement nul	222
9.3.1	Mélanges retenus pour l'étude	223
9.3.2	Nouvelle approche : comparaison directe mesures/simulations numériques	224
9.3.3	Incertitudes liées aux modèles d'extrapolation	226
9.3.4	Conclusion	230

9.1 Les effets des échanges radiatifs d'énergie thermique

Cette section présente l'étude de l'impact du milieu réactionnel sur les propriétés de la flamme, et plus précisément l'impact des effets des transferts thermiques radiatifs sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire à étirement nul pour des mélanges comportant dans les gaz frais une forte proportion d'espèce(s) capable(s) d'absorber le rayonnement émis par les gaz brûlés chauds.

9.1.1 Choix du mélange

Afin d'étudier les effets du rayonnement thermique des gaz brûlés sur la vitesse de combustion laminaire S_l^0 pour des mélanges capables d'absorber dans les gaz frais une grande quantité de ce rayonnement, le mélange combustible proposé par *Z. Chen* dans [185] a été sélectionné. Il est composé de la manière suivante :

- carburant : CH_4 ,
- comburant : un mélange ($0.3 O_2 + 0.5 CO_2 + 0.2 He$). Les coefficients représentent pour chaque espèce la fraction molaire.

Ce mélange a été privilégié car il a, grâce à l'ajout de l'hélium, un nombre de Lewis proche de l'unité quelle que soit la richesse. La figure 9.1 présente en fonction de la richesse l'évolution des nombre de Lewis effectif, du réactif en excès (E) et en déficit (D) de ce mélange. La maîtrise

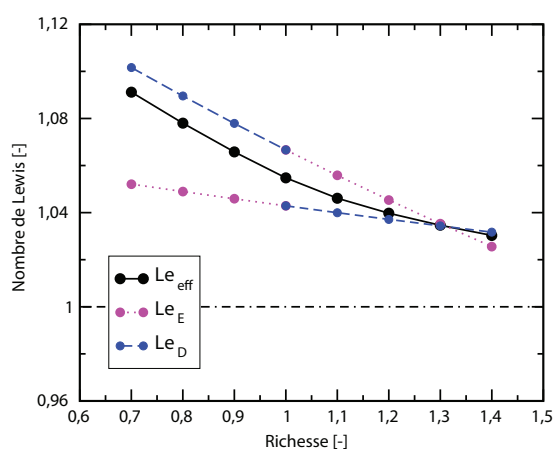


FIGURE 9.1 – Evolution en fonction de la richesse du nombre de Lewis effectif à pression atmosphérique pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$.

du nombre de Lewis du mélange permet ainsi de dé-corréler les effets de diffusion préférentielle

ou autres perturbations comme les instabilités hydrodynamiques des effets liés aux transferts radiatifs qui sont étudiés. De plus, comme il a été démontré dans la Partie II, les deux dispositifs expérimentaux peuvent être utilisés avec leurs diagnostics respectifs sans aucune restriction sur ce mélange. L'étude sur celui-ci s'est effectuée sur une large gamme de richesse et de pression, étendant les résultats et analyses proposés dans [185]. Les résultats expérimentaux qui y sont présentés résultent de la superposition d'au minimum trois essais distincts pour chaque mélanges et conditions thermodynamiques étudiés.

9.1.2 Analyse sur les vitesses de flamme extrapolées à étirement nul

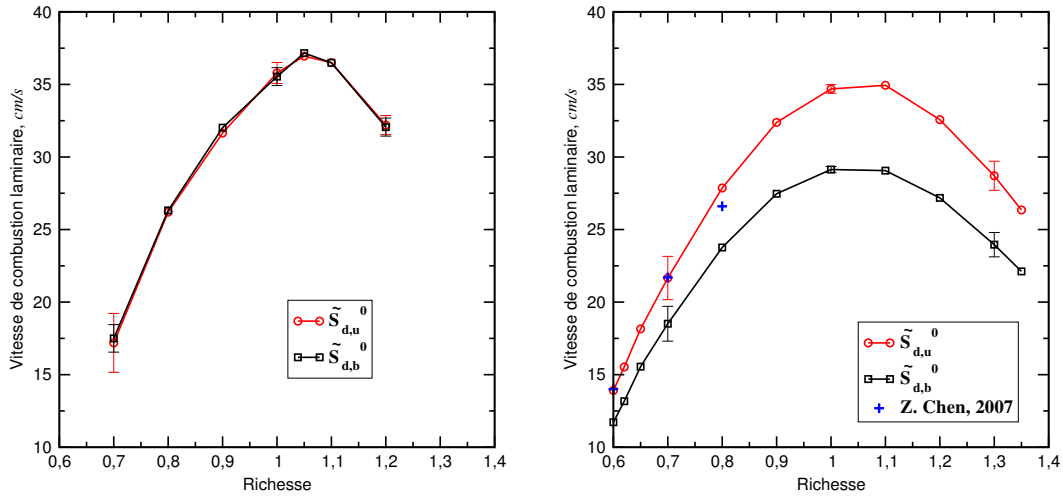
Les mesures de vitesses caractéristiques de flamme réalisées au laboratoire CORIA seront exploitées pour exprimer à l'aide du modèle d'extrapolation à étirement nul non-linéaire Eq. 3.34 la vitesse de combustion laminaire par ces deux définitions cinématiques $\tilde{S}_{d,u}$ et $\tilde{S}_{d,b}$ et leurs longueurs de Markstein respectives $\ell_{d,u}$ et $\ell_{d,b}$. Notons que les incertitudes de chacune de ces vitesses sont calculées selon la méthode proposée par *C. Xiouris, F.N. Egolfopoulos et al.* dans [45] sur les valeurs brutes de vitesses.

9.1.2.1 Résultats à pression atmosphérique

La figure 9.2 illustre les effets du rayonnement thermique radiatif sur l'estimation de la LBV en présentant les vitesses $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$, déterminées d'un côté sur des flammes CH_4/air (a) et de l'autre sur des flammes $CH_4/(0.3 O_2 + 0.5 CO_2 + 0.2 He)$ (b).

Elle met clairement en évidence un impact non négligeable du comburant car les deux modèles donnent les mêmes résultats sur des flammes CH_4/air alors qu'il n'y a pas superposition des résultats sur des flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$. En effet, pour des richesses $\phi > 0.7$, il n'y a pas de recouvrement possible des intervalles d'incertitudes. Pour ce mélange, la vitesse $\tilde{S}_{d,u}^0$ est supérieure à $\tilde{S}_{d,b}^0$. La comparaison présentée sur la figure 9.2(b) avec les résultats issus des simulations de *Z. Chen* dans [185] montre que l'extrapolation à étirement nul des mesures des vitesses $\tilde{S}_{d,u}$ est plus proche des résultats numériques que celle des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$. Ce résultats est intuitif car la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ s'exprime avec la densité des gaz brûlés calculée à l'équilibre thermodynamique adiabatique. Or cet équilibre surestime la température de fin de combustion puisque les échanges radiatifs ne sont pas pris en compte et donc la densité réelle des gaz brûlés doit être supérieure à la densité calculée : $\rho_b > \rho_b^{eq}$.

Par ailleurs, *Jayachandran et al.* [67] ont démontré dans leurs récents travaux numériques que la



(a) CH_4/air

(b) $CH_4/O_2 - CO_2 - He$

FIGURE 9.2 – Comparaison des vitesses de flamme à étirement nul $S_{d,u}^0$ et $S_{d,b}^0$ en fonction de la richesse aux conditions atmosphériques de pression et de température. Les données numériques de *Z. Chen* [185] sont superposées sur la figure (b).

vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ n'était pas modifiée par la modélisation des transferts radiatifs d'énergie thermique contrairement à la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$. La figure 3.11 a présenté ce résultat en traçant en fonction de l'étirement ces deux vitesses sans et avec prise en compte du rayonnement dans la limite du modèle optiquement mince. Elle montre un comportement fonction du modèle de rayonnement avec l'étirement pour la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$, tel que la prise en compte du rayonnement fait décroître la vitesse de propagation du front de flamme pour de grands rayons de flamme alors que les vitesses $\tilde{S}_{d,u}$ se superposent quel que soit le modèle utilisé dans les mêmes conditions. Leur conclusion est donc que cette vitesse peut être représentée par une simulation adiabatique. De plus, les modèles d'extrapolation à étirement nul sont construits à partir de l'hypothèse d'une flamme adiabatique. Ils ne peuvent donc pas prendre en compte le rayonnement thermique sous leurs formes définies au chapitre 3 : Eq. 3.30 et Eq. 3.34. L'extrapolation à étirement nul de la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ apparaît alors problématique pour ces mélanges.

De plus, la différence entre les valeurs extrapolées $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$ est fonction de la richesse du mélange combustible. Pour représenter plus clairement cette dépendance, la figure 9.3 présente l'évolution du rapport relatif des vitesses de flamme (*RFSR*) en fonction de la richesse sur des flammes $CH_4/(0.3 O_2 + 0.5 CO_2 + 0.2 He)$ aux conditions atmosphériques de température et de pression. Ce rapport représente la différence normalisée entre les deux valeurs à étirement

nul $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$ et se définit par :

$$RFSR = \frac{\tilde{S}_{d,u}^0 - \tilde{S}_{d,b}^0}{\tilde{S}_{d,b}^0}. \quad (9.1)$$

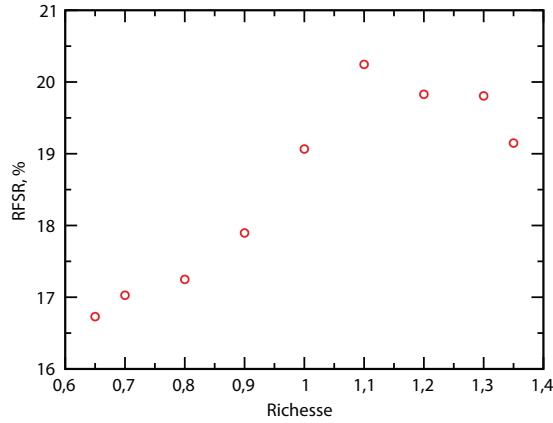
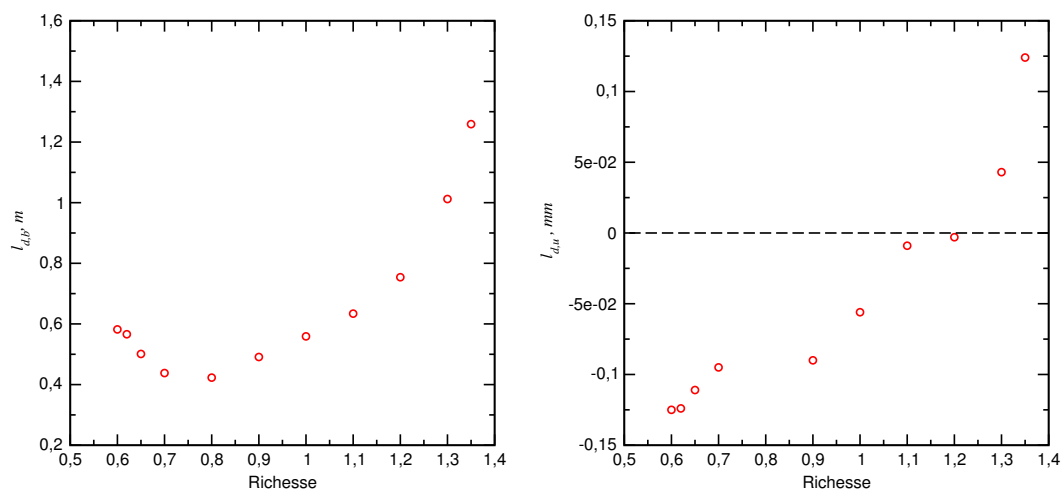


FIGURE 9.3 – Rapport relatif des vitesses de flamme à étirement nul en fonction de la richesse pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à pression atmosphérique.

La figure 9.3 démontre que la différence entre les valeurs estimées $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$ est fonction de la richesse. Elle est maximale, à plus de 21 %, proche de la richesse $\phi = 1.1$ où les vitesses caractéristiques de la flamme sont elles aussi maximales et diminue de manière monotone autour de cette richesse. Pour compléter ces résultats, la figure 9.4 représente les longueurs de Markstein $\ell_{d,u}$ et $\ell_{d,b}$ en fonction de la richesse pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à pression et température atmosphériques.

La comparaison des figures 9.4(a) et 9.4(b) dénote une différence d'évolution des deux longueurs de Markstein. La longueur de Markstein $\ell_{d,u}$ change de signe autour de la richesse $\phi = 1.2$, telle qu'elle soit négative pour les richesses inférieures et positive pour les richesses supérieures. Au contraire, $\ell_{d,b}$ est positive quelle que soit la richesse du mélange, i.e. que la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ diminue avec l'étirement. $\ell_{d,b}$ croît de manière monotone de part et d'autre de sa valeur minimale entre les richesses $\phi = 0.7$ et $\phi = 0.8$. Ce comportement de la longueur de Markstein est cependant déroutant au vue de l'évolution du nombre de Lewis du mélange qui ne fait que décroître avec l'augmentation de la richesse. En effet, pour un mélange CH_4/air dans les mêmes conditions, dont le nombre de Lewis suit une évolution similaire avec la richesse, l'évolution de la longueur de Markstein $\ell_{d,b}$ ne fait que croître comme le démontre la figure 9.5 extraite de [70]. Dès lors, ce résultat démontre une évolution de la sensibilité de la flamme à l'étirement pour ces mélanges



(a) $l_{d,b}$: longueurs de Marstein liée à $S_{d,b}$

(b) $l_{d,u}$: longueurs de Marstein liée à $S_{d,u}$

FIGURE 9.4 – Evolution en fonction de la richesse des longueurs de Markstein $l_{d,u}$ et $l_{d,b}$ de flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ aux conditions atmosphériques de température et de pression.

très pauvres qui n'est pas en accord avec les observations de la littérature présentées sur la figure 9.5 sur des mélanges dont le nombre de Lewis évolue de la même manière. Les différentes publications montrent une évolution monotone de la longueur de Markstein, qui copie celle l'évolution du nombre de Lewis. Dès lors, cette différences peut être attribuée à des effets de transfert radiatif. Plus la richesse diminue et plus la sensibilité de la flamme à l'étirement est importante puisque la longueur de Markstein correspondante augmente. Pour permettre une analyse plus complète de cette observation, des simulations DNS devraient être réalisées afin d'étudier les temps caractéristiques de mise en place des échanges radiatifs comparés à ceux de la chimie de ces flammes et aussi étudier l'impact cinétique de la présence en forte quantité de CO_2 .

9.1.2.2 Résultats à des pressions supérieures à la pression atmosphérique

Dans le but d'analyser les causes de la différence entre les deux définitions de la LBV pour le mélange radiatif, des mesures ont été effectuées à température ambiante pour des valeurs de pression initiale supérieures à la pression atmosphérique. La figure 9.6 présente pour plusieurs richesses en fonction de la pression l'évolution des vitesses $\tilde{S}_{d,b}^0$ (a) et $\tilde{S}_{d,u}^0$ (b).

Chacune de ces vitesses diminue avec l'augmentation de pression quelle que soit la richesse.

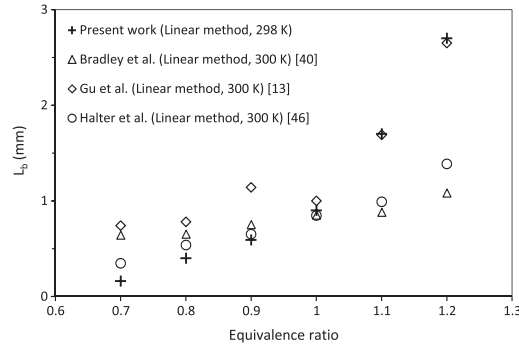


FIGURE 9.5 – Evolution de la longueur de Markstein associée à la vitesse de propagation du front de flamme $S_{d,b}$ d'un mélange CH_4/air , extrait de [70].

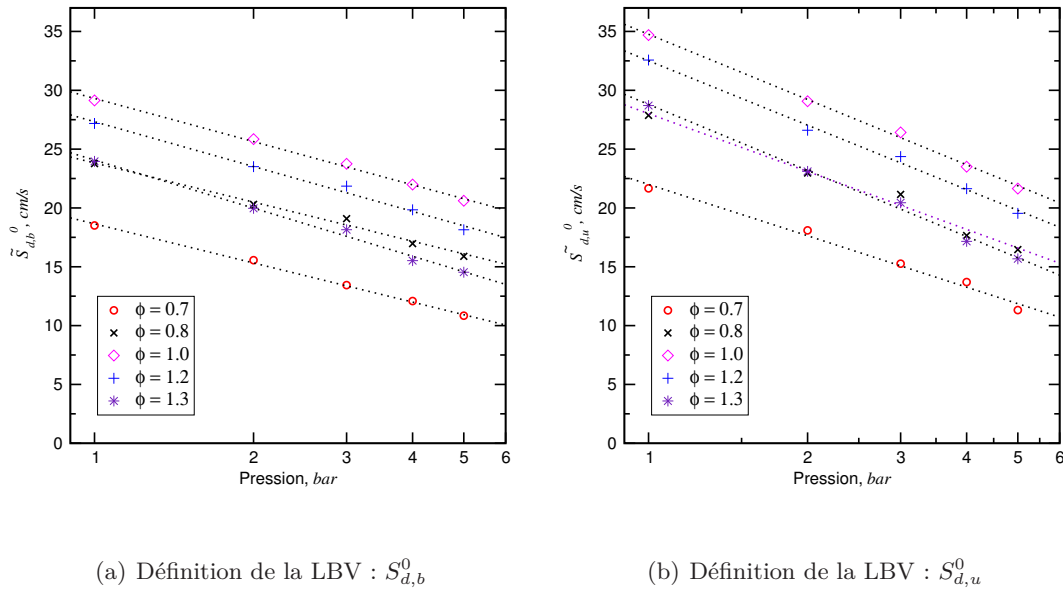


FIGURE 9.6 – Evolution des vitesses de flamme à étirement nul $S_{d,u}^0$ et $S_{d,b}^0$ pour différentes richesses en fonction de la pression du mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à température ambiante.

Cette évolution avec la pression peut se représenter sous la forme d'une loi d'évolution, de type :

$$S^0(P) = S^0(P_{ref}) \left(\frac{P}{P_{ref}} \right)^\alpha, \quad (9.2)$$

avec α un paramètre relié à l'ordre de la réaction n par $\alpha = n/2 - 1$. Pour la plupart des hydrocarbures, n est inférieur à 1.5.

La figure 9.7 trace en fonction de la richesse l'évolution du paramètre α de cette loi.

Elle démontre que les deux définitions cinématiques de la LBV définissent une loi d'évolution propre avec la pression. Ces deux vitesses suivent une loi logarithmique telle que l'exposant α

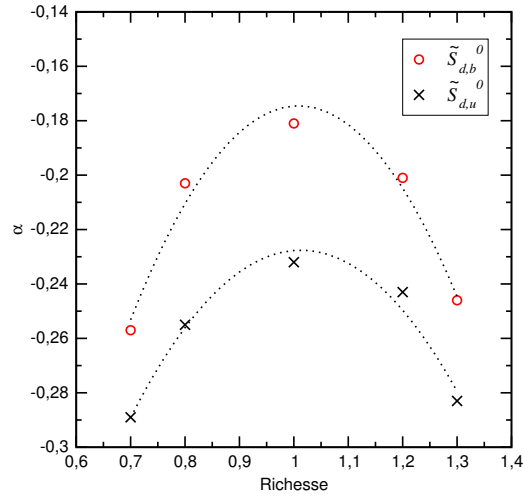


FIGURE 9.7 – Loi d'évolution avec la pression (Eq. 9.2) des vitesses à étirement nul $S_{d,u}$ et $S_{d,b}$ en fonction de la richesse pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$.

ait une évolution parabolique, avec une valeur absolue minimale autour de la richesse stoechiométrique. Notons que l'évolution parabolique en fonction de la richesse du paramètre α avec la pression, Eq. 9.2, est observable pour d'autres carburants comme démontré dans [42].

Néanmoins, il apparaît que la différence entre les deux vitesses $\tilde{S}_{d,b}^0$ et $\tilde{S}_{d,u}^0$ diminue avec l'augmentation de pression, comme le démontre la figure 9.8 qui représente l'évolution en fonction de la pression du rapport $RFSR$ des résultats du mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à température ambiante présentés Fig. 9.6 pour plusieurs richesses.

Pour toutes ces richesses, la figure 9.8 montre une décroissance monotone du rapport $RFSR$ avec l'augmentation de la pression. Ainsi, la détermination expérimentale de la vitesse de combustion laminaire semble se soustraire de la définition de vitesse mesurable utilisé, $\tilde{S}_{d,b}$ ou $\tilde{S}_{d,u}$, pour converger vers une seule valeur.

Au final, plusieurs pistes pour expliquer l'influence des effets de transferts radiatifs d'énergie thermique sur la mesure de la LBV peuvent être :

1. l'impact du rayonnement thermique sur l'état thermodynamique des gaz (frais et brûlés) diminue avec la pression. Avec l'augmentation de la densité, les échanges radiatifs s'opèrent entre des zones spatialement plus petites, ce qui diminue leur influence sur la valeur moyenne de l'état thermodynamique. Les milieux sont plus homogènes et les hypothèses de développement des équations de détermination de la vitesse de combustion

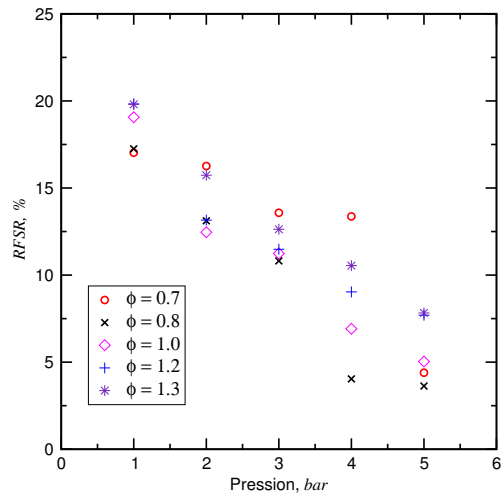


FIGURE 9.8 – Rapport relatif des vitesses de flamme à étirement nul (RFSR Eq. 9.1) en fonction de la pression pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$.

laminaire sont moins éloignées des conditions rencontrées réellement.

2. l'impact du modèle d'extrapolation à étirement nul est réduit, car le comportement de ces vitesses vis-à-vis du rayonnement change avec la pression.
3. les deux effets (rayonnement + modèle) se conjuguent.

Pour aller plus loin dans cette analyse, il faut alors être capable de caractériser seuls les échanges thermiques radiatifs mis en place lors de la propagation de la flamme SEF. Pour cela, un dispositif de mesure in-situ du profil de température en un point à l'intérieur de la cellule de mesure a été mis en place au laboratoire PRISME, cf Chap. 5.

9.1.3 Mesure de profils ponctuels temporels de température

Afin de pouvoir étudier les échanges radiatifs d'énergie thermique, un dispositif expérimental basé sur des mesures ponctuelles par photo-multiplicateur de la diffusion Rayleigh du milieu réactif est introduit. L'intégralité de ce dispositif est présenté au chapitre 5. Il permet la détermination du profil de température en un point de l'espace pendant la propagation d'un front de flamme dans une enceinte fermée. Le but de ces mesures est de mettre en évidence l'impact des échanges radiatifs d'énergie thermique au cours du temps sur les propriétés des gaz frais et des gaz brûlés, i.e. dans les domaines amont et aval au passage du front de flamme. Pour cela, les conditions de température et de pression étudiées sont identiques aux précédentes effectuées sur

le dispositif du laboratoire CORIA. Les résultats sont représentés de deux manières différentes :

- soit le profil de diffusion Rayleigh mesuré brut est présenté sans introduire d’hypothèses pour le post-traiter,
- soit le profil de température est reconstruit depuis ce signal, en supposant une composition locale pour les gaz brûlés égale à celle résolue par un calcul à l’équilibre chimique permettant d’estimer la section efficace de diffusion Rayleigh locale.

Dans un premier temps, les résultats présentés seront basés sur les profils de température. Puis une comparaison directe entre les profils de diffusion Rayleigh des mélanges CH_4/air et $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ sera présentée pour statuer sur les transferts radiatifs d’énergie thermique dans nos mesures.

Alors que les mesures de vitesses caractéristiques du mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ ont été réalisées au laboratoire CORIA sur un dispositif permettant de réguler en même temps les quatre gaz qui le compose, la mise en place d’un tel système sur le dispositif du laboratoire PRISME n’a pas été sélectionnée. Il a été choisi, pour des raisons techniques et afin de réduire au maximum les incertitudes (intrinsèque et déviation) sur la composition, de réaliser une bouteille de prémélange du comburant. Sa composition molaire est : $(0.3 O_2 + 0.5 CO_2 + 0.2 He)$. Elle a été vérifiée par chromatographie en phase gazeuse avec le dispositif déjà présenté au chapitre 7. L’analyse de deux prélèvements a validé la composition du prémélange suivante :

- 30.10 % d’ O_2 ,
- 51.27 % de CO_2 et
- 18.51 % d’ He .

N.B : la somme des pourcentage est égale à 99.87 % et non 100 à cause de l’incertitude liée à l’appareil.

Les mélanges combustibles obtenus avec ce comburant sont parfaitement comparables à ceux réalisés dans l’enceinte de mesure du laboratoire CORIA où les quatre gaz sont régulés séparément.

Les figures 9.9 et 9.10 présentent en fonction du temps les profils de température ponctuels déterminés expérimentalement pour les trois richesses : $\phi = 0.8, 1.0$ et 1.2 , respectivement à la pression atmosphérique et à une pression initiale de $3 bar$.

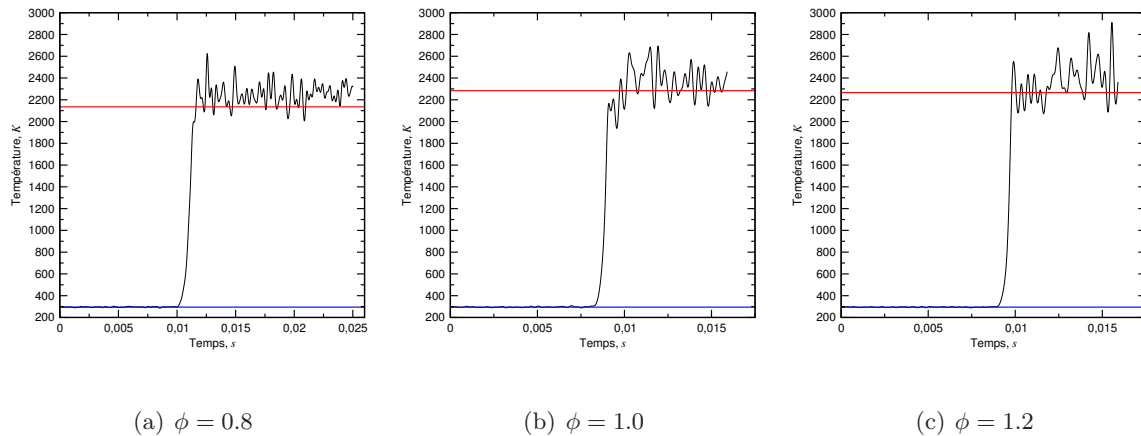


FIGURE 9.9 – Profils de température mesurés en un point par diffusion Rayleigh sur des flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ pour trois différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression.

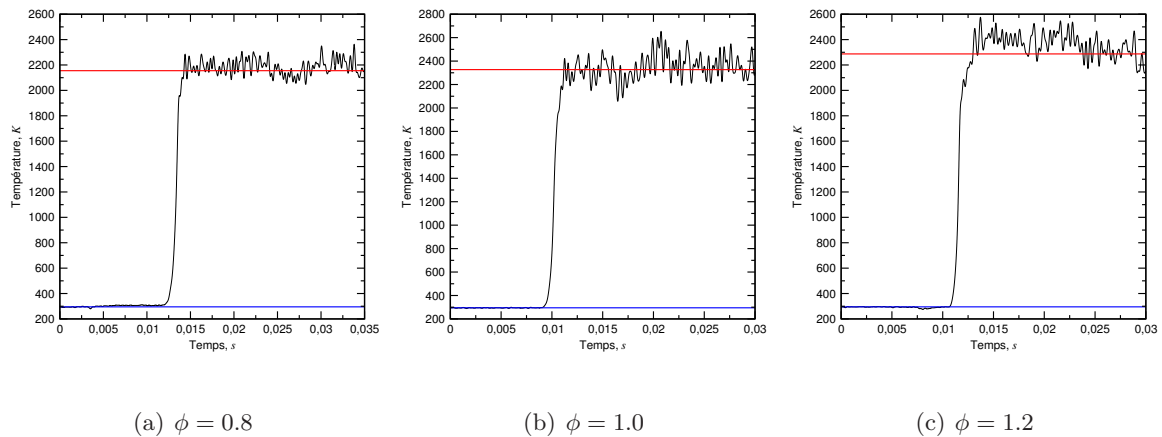


FIGURE 9.10 – Profils de température mesurés en un point par diffusion Rayleigh sur des flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ pour trois différentes richesses à la température ambiante et une pression $P = 3 \text{ bar}$.

Les profils présentés sur ces figures sont issus du traitement de signaux de diffusion Rayleigh bruts et n'ont pas subi de filtrages numériques additionnels. Ils sont représentés jusqu'au temps où l'élévation de la pression dans la chambre atteint 5 % de la pression initiale. Ils montrent que pour chacune des conditions de richesse ou de pression, la température adiabatique de fin de combustion, représentée en rouge sur ces figures, est atteinte directement voir dépassée après le passage du front de flamme puis conservée sur la plage de temps observée. Les transferts radiatifs n'apparaissent donc pas clairement sur ces profils comme réduisant la température de fin de combustion ou bien encore refroidissant le coeur de gaz brûlés lorsque la flamme est

développée. Leur présence est donc indiscernable dans ces profils temporels de température où l'hypothèse d'un état d'équilibre thermodynamique des gaz brûlés est imposée.

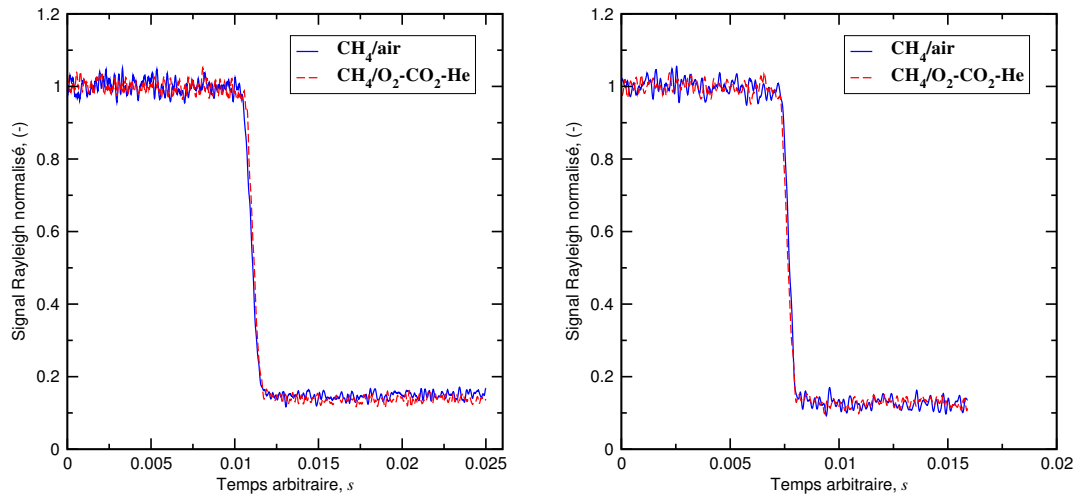
Afin d'évaluer l'impact de cette dernière hypothèse, la figure 9.11 présente superposés pour les trois richesses : $\phi = 0.8, 1.0$ et 1.2 , les profils de diffusion Rayleigh mesurés normalisés de flammes CH_4/air et $CH_4/O_2 - CO_2 - He$. Pour ces deux mélanges, les températures de fin de combustion adiabatique sont proches pour chacune des richesses étudiées, comme présentés dans le tableau 9.1. En effet, une différence de $150 K$ à plus de $2000 K$ est minime. Cette particularité permet des comparaisons directes entre les signaux. Notons qu'ils sont considérés comme des mesures directes car ne subissant aucun filtrage numérique.

Richesse	0.8	1.0	1.2
$T^{ad} (CH_4/air), K$	1996	2226	2137
$T^{ad} (CH_4/O_2 - CO_2 - He), K$	2135	2284	2266

TABLE 9.1 – Température à l'équilibre chimique adiabatique pour différentes richesses des deux mélanges CH_4/air et $CH_4/O_2 - CO_2 - He$.

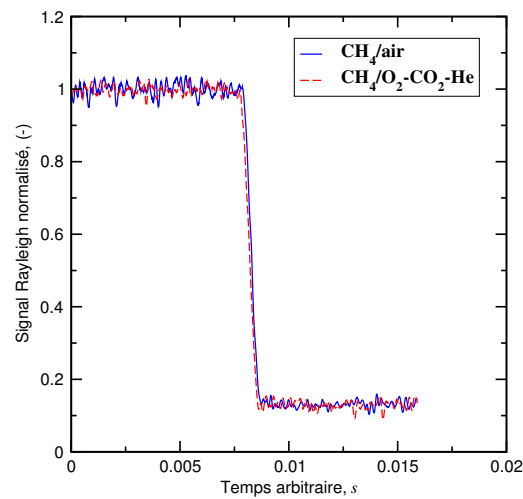
La figure 9.11 met explicitement en évidence par la comparaison avec un mélange CH_4/air que les échanges radiatifs d'énergie thermique n'ont pas d'impact mesurable sur les profils, i.e. donc sur l'état thermodynamique local ou la température. Les profils ont une allure identique pour les deux mélanges quelle que soit la condition de pression ou de richesse. La mise en place de transferts radiatifs modifiant l'état thermodynamique local pendant l'intervalle de temps enregistré n'est pas détectée. Sur cette plage de temps le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ comportant une grande quantité dans les gaz frais de CO_2 capable d'introduire des transferts radiatifs d'énergie thermique a le même comportement que le mélange CH_4/air qui n'implique pas d'échanges entre les gaz brûlés et les gaz frais dans ces conditions. Ainsi, les mesures qu'il est possible de réaliser pour ces gammes de rayons de flamme ne semblent pas influencées par les effets d'échanges d'énergie thermique radiatifs. Il semble donc que ce soit l'utilisation des modèles d'extrapolation qui introduise une différence entre les deux définitions cinématiques de la LBV à étirement nul. Les effets de ces échanges interviennent pour des flammes plus développées, caractérisées par de grands rayons. Or ce sont ces rayons de flamme qui sont modélisés au travers de l'extrapolation à étirement nul.

Néanmoins, le modèle non-linéaire utilisé dans cette étude prédit une vitesse comparable à S_l^0 lorsqu'il est utilisé avec la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$. En revanche, et même si le nombre de Lewis du mélange



(a) $\phi = 0.8$

(b) $\phi = 1.0$



(c) $\phi = 1.2$

FIGURE 9.11 – Superposition des profils de diffusion Rayleigh mesurés sur des flammes CH_4/air et $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ pour trois différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression.

radiatif $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ est ajusté proche de l'unité, ce modèle d'extrapolation sous-estime la LBV avec la définition $\tilde{S}_{d,b}$. Ces résultats soulèvent donc une question quant à l'association entre les modèles d'extrapolation et les vitesses mesurées. Pour ce type de mélange au nombre de Lewis proche de l'unité, les modèles d'extrapolation linéaire, Eq. 3.30, et non-linéaire, Eq. 3.34, sont équivalents. L'étude numérique de *Jayachandran et al.* [67] a démontré que la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$

n'était pas fonction des modèles de rayonnement thermique utilisés contrairement à la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$. De plus, leurs résultats ont montré que l'extrapolation linéaire de la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ évaluée une vitesse à étirement nul proche de la LBV S_l^0 . Dès lors, une comparaison directe entre les résultats expérimentaux présentés sur le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ et une simulations DNS de ceux ci serait nécessaire pour statuer sur cette question. Elle permettrait une analyse plus complète de cette influence du modèle d'extrapolation en fonction de la vitesse en réalisant des flammes laminaire .

Enfin, il faut noter avant de conclure que les mesures réalisées par diffusion Rayleigh montrent ici leurs limites. Il faut introduire une hypothèse sur l'état cinétique et thermodynamique des gaz brûlés qui influence directement les résultats pour pouvoir estimer la température locale depuis ces mesures. De plus, si les échanges thermiques sont faibles, i.e. quelques dizaines de Kelvin, la variation de température ne peut pas être identifiée par ce type de dispositif sur les flammes sphériques instationnaires car elle est inférieure au bruit de mesure intrinsèque, provoqué par la transmission à travers les hublots, les réflexions au sein de la cellule, etc...

9.1.4 Conclusion

Pour conclure, la détermination de la vitesse de combustion laminaire sur un mélange propice aux transferts radiatifs d'énergie thermique a mis en évidence une disparité des définitions expérimentales extrapolée à étirement nul. Les vitesses $\tilde{S}_{d,b}^0$ et $\tilde{S}_{d,u}^0$ sont différentes pour chaque condition thermodynamique et de richesse étudiées. Cette différence est telle qu'elle diminue avec l'augmentation de pression quelle que soit la richesse et présente pour chaque pression une valeur maximale à la richesse $\phi = 1.1$ qui a été mise clairement en évidence par l'expression du rapport relatif des vitesses de flamme $RFSR$. La comparaison avec des résultats numériques de la littérature a montré un meilleur accord numérique/expérience lorsque la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ est utilisée pour évaluer vitesse de combustion laminaire. Afin d'étudier l'impact du rayonnement thermique et de pouvoir qualifier un changement d'état thermodynamique dû à la mise en place d'échanges radiatifs, des mesures ponctuelles de température par diffusion Rayleigh ont été réalisées en fonction du temps. Les résultats n'ont montré aucun changement détectable pouvant être attribué à des effets de transferts radiatifs et ce même si le point de mesure a été placé volontairement à une distance $d = 20 \text{ mm}$ du point d'allumage pour laisser le temps à la flamme de se développer. Pour toutes les conditions thermodynamiques et de richesses étudiées, la combustion du mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ atteint la température de fin de combustion

adiabatique estimée par solveur d'équilibre chimique et la conserve sur un intervalle de temps fixé et limité à une élévation de pression dans la cellule de mesure de 5 % de la valeur initiale. Ainsi, il n'y a pas de mise en place d'échanges radiatifs d'énergie thermique significatifs, capables de modifier visiblement les vitesses caractéristiques d'une flamme, même lorsque des espèces fortement radiatives dans la bande spectrale correspondant à l'émission des gaz brûlés chaud sont présentes.

La flamme étant instationnaire, il apparaît que les temps caractéristiques de la mise en place des transferts d'énergie thermique radiatifs sont supérieurs au temps de propagation du front de flamme. Les effets ne sont pas mesurables sur la gamme de rayons mesurés expérimentalement mais l'extrapolation à étirement nul peut être la cause des différences observées entre $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$. Le comportement de la flamme réelle n'étant pas nécessairement représenté par les modèles d'extrapolation à étirement nul pour ce type de mélange et même si sur la plage de mesure les effets du rayonnement sont non mesurables, ils agissent à de plus forts rayons et doivent être pris en compte dans la modélisation de l'évolution des vitesses caractéristiques de flamme. Le couple $\tilde{S}_{d,b}$ et modèle d'extrapolation non-linéaire utilisé n'apparaît pas exploitable pour ces conditions en l'état. Au contraire la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ semble adaptée pour estimer la LBV à l'aide du même modèle d'extrapolation à étirement nul. Et puisque le nombre de Lewis du mélange est proche de 1, les modèles d'extrapolation linéaire et non-linéaire sont équivalents. Ainsi ces résultats expérimentaux sont en accord avec l'étude numérique de *Jayachandran et al.* [67] ayant démontré l'insensibilité de cette vitesse à la modélisation du rayonnement thermique dans les codes de calcul numérique. La vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ se présente donc comme un bon candidat pour estimer par extrapolation à étirement nul la vitesse de combustion laminaire pour ce type mélange combustible dont l'utilisation d'un modèle d'extrapolation linéaire est valide. L'utilisation de la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$ nécessite quant à elle une analyse plus complète des modèles d'extrapolation. Celle-ci pourrait être effectuée à partir d'une simulation DNS reproduisant les expériences réalisées ici.

Par ailleurs, il faut noter que la vitesse de consommation, Eq. 8.41, détermine par extrapolation linéaire à étirement nul une valeur de la LBV proche des simulations DNS 1D comme l'illustre la figure 9.12.

Ce résultat prometteur reste néanmoins critiquable à cause de la dispersion de mesure. L'extrapolation du nuage de point reste la limite de cette méthode pour une utilisation exclusivement expérimentale et une confrontation avec des résultats numériques pourrait minimiser l'incertitude sur la valeur à étirement nul S_c^0 .

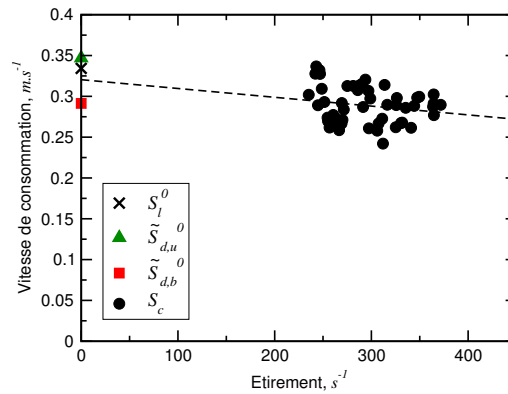


FIGURE 9.12 – Vitesse de consommation d’un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à richesse $\phi = 1.0$ aux conditions atmosphériques de température et de pression.

Au final, le couple composé de la définition de la vitesse de consommation et d’un modèle d’extrapolation linéaire (Eq. 3.30) évalue une valeur de la vitesse de combustion laminaire très proche de la valeur simulée S_l^0 . Cette définition semble alors pouvoir, comme la définition $\tilde{S}_{d,u}$, prendre en compte intrinsèquement les effets du rayonnement d’énergie thermique. De nouvelles simulations pourraient permettre d’analyser cette observation sur le nuage de données expérimentales.

Tous les résultats présentés ici doivent conduire à des simulations de type DNS avec et sans prise en compte du rayonnement thermique pour analyser plus en détail la sensibilité des différentes vitesses liées à la S_l^0 et expérimentalement mesurables avec les modèles d’extrapolation. Ces simulations pourront notamment être réalisées avec le CODE YALES2 dans une configuration de flamme sphérique 3D, développée et validée dans les sections précédentes.

9.2 Les effets de diffusion différentielle

L'ensemble des résultats précédents a montré les problèmes liés à l'extrapolation à étirement nul des vitesses caractéristiques mesurées, que ce soit l'incertitude intrinsèque associée à un modèle d'extrapolation ou bien l'incapacité qu'ont ces modèles à prédire l'évolution d'une flamme soumise à des effets de transferts radiatifs d'énergie thermique. En effet, dans la gamme de rayons de flamme classiquement mesurée avec une configuration sphérique comprise entre 10 et 20 *mm* (cf Chap. 7 qui présente plusieurs dispositifs expérimentaux), les effets de ce rayonnement ne sont pas perceptibles sur les vitesses caractéristiques de flamme. Et c'est à de plus grands rayons, devant être représentés par les modèles d'extrapolation à étirement nul, qu'ils interviennent. Mais ces effets ne sont pas les seuls sources d'incertitude sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire et les vitesses caractéristiques de flamme, dans leur définition mesurable, peuvent elles mêmes ne pas représenter cette vitesse fondamentale.

La nécessité de réduire les émissions de polluants et la pénurie des ressources en énergie fossile incitent à développer de nouveaux carburants ou procédés de combustion plus propres. Parmi ces futurs carburants et procédés, de nombreux sont composés initialement d'une grande quantité d'espèces *CO* et *CO₂* dont les bandes spectrales coïncident avec celles d'émission des espèces majoritaires dans les gaz brûlés. Il s'agit par exemple des biogaz ou SynGaz, des carburants issus de la gazéification de la biomasse, de l'oxycombustion diluée, etc... Ils font appel aux connaissances sur les milieux rayonnants et induisent des transferts radiatifs d'énergie thermique entre les gaz brûlés, chauds et produits par la combustion, et les gaz frais, qui n'ont pas encore réagis. Mais tous ces carburants forment avec l'air ou d'autres mélanges comburants utilisés sur les installation fixes, comme l'oxycombustion, etc..., des mélanges combustibles dont le nombre de Lewis effectif peut être fortement différent de 1 et les nombres de Lewis de chaque espèce présente sont fortement différents les uns des autres. La mise en place de phénomènes de diffusion différentielle au sein du front de flamme pouvant modifier la réactivité de la combustion est alors à prendre en compte.

Dans la plupart des phénomènes de combustion subsonique, la diffusion de masse est dominée par la diffusion de Fick, provoquée par les gradients de concentration. Ce mode de diffusion n'est cependant pas unique et une diffusion de masse peut être induite par les gradients de température. Ce mode de diffusion est appelé diffusion de Soret [186]. Il peut être significatif devant celui de Fick pour des molécules très légères ou très lourdes soumises à un fort gradient de

température, comme peut l'être la zone de réaction dans le front de flamme, telles que les espèces légères migrent vers ce gradient alors que les espèces lourdes s'en éloignent. *Yang et al.* [187] ont montré que ce phénomène de diffusion a peu d'impact sur les flammes planes non étirées de *n-butane/air* et *H₂/air* en étudiant la diffusion de l'atome *H* et de la molécule *H₂*. En effet, ces deux espèces sont primordiales dans les phénomènes de combustion d'hydrocarbures car elles pilotent les deux plus importantes réactions du procédé de combustion : $H + O_2 = O + OH$ et $CO + OH = CO_2 + H$. L'impact de leur forte diffusivité est faible sur cette configuration de flamme car la température de fin de combustion adiabatique n'est pas modifiée. En revanche, elle est modifiée pour des flammes étirées, comme l'ont démontré plusieurs études [83, 85, 188]. En supposant la densité des gaz brûlés homogène en espace pour une flamme faiblement étirée, il est possible de définir une loi d'évolution de la température de fin de combustion en fonction de l'étirement du front de flamme par :

$$\frac{T_b - T_{ad}}{T_{ad}} = \left(\frac{1}{Le_D} - 1 \right) \frac{D_{th}}{(S_l^0)^2} \kappa. \quad (9.3)$$

Dans cette équation, D_{th} est la diffusivité thermique du mélange et le_D le nombre de Lewis du réactif déficient.

L'étude numérique de *Williams et al.* [189] sur les flammes de diffusion de *CH₄/air* a démontré que lorsque la diffusion de Soret est prise en compte dans les codes de calcul, les limites d'inflammabilité des flammes étirées sont étendues et la concentration en radical *H* augmente, augmentant ainsi le taux de réaction. De même, *Liang et al.* [114] ont montré pour des mélanges *H₂ + CO/air* en configuration de flammes sphériques que l'impact de la diffusion de Soret est non négligeable et qu'il augmente avec la pression initiale tel qu'il est piloté majoritairement par l'atome *H* à pression atmosphérique puis par la molécule *H₂* lorsque la pression augmente. L'impact de la diffusion de l'espèce *CO* a lui été démontré comme négligeable. De plus, leurs travaux ont montré que l'impact de la diffusion de Soret est accentué pour des étirements positifs, i.e. particulièrement pour de faibles rayons de flamme où ils sont très importants, et qu'il diminue avec la pression et la température. Ainsi, une étude numérique portée sur l'analyse des effets de la diffusion différentielle dans un front de flamme doit prendre en compte le phénomène de diffusion de Soret.

Les études de *Yang et al.* [190] et *Varea et al.* [44] suggèrent une interprétation mécanique de l'impact de cette diffusion sur les vitesses de flammes et les propriétés thermodynamiques des gaz brûlés pour des flammes réalisées avec de l'*H₂* comme carburant. Elles proposent toutes les deux de considérer une augmentation de la richesse locale à cause de la plus grande diffusivité

des espèces H_2 et H . Ainsi, pour les mélanges pauvres, l'augmentation de la richesse locale provoque un comportement super-adiabatique du mélange et la température des gaz brûlés est supérieure à la température de fin de combustion adiabatique calculée avec la richesse initiale. Pour les mélanges riches ($\phi > 1.7$), la température est quant à elle inférieure à la température de fin de combustion adiabatique calculée avec la richesse initiale et c'est un comportement sub-adiabatique qui est observé. Dans ce cas, la vitesse de combustion laminaire sera modifiée par la prise en compte de cet effet.

La suite de cette section présente une étude des effets de la diffusion préférentielle sur la détermination expérimentale de la vitesse de combustion laminaire. Dans un premier temps, le mélange utilisé pour cette étude est présenté. Puis une analyse sur des profils temporels de température de mélanges riches et pauvres est proposée. Enfin, l'impact sur la détermination de la vitesse de combustion laminaire pour ce type de mélange est analysé sur les trois définitions : S_c , $\tilde{S}_{d,u}$ et $\tilde{S}_{d,b}$.

9.2.1 Le mélange étudié

Pour étudier les effets de diffusion différentielle, le mélange combustible doit comporter des espèces aux nombres de Lewis fortement différents les uns des autres. Ainsi, cette étude est portée sur les mélanges H_2/air , avec un air contenant $\sim 21\%$ d' O_2 . L'hydrogène est un combustible composant plusieurs SynGaz et présente un fort intérêt écologique puisque sa combustion ne rejette pas d'oxydes de carbone (CO , $CO_2\dots$). De plus, il est aussi fortement étudié pour des raisons de sûreté nucléaire car il est créé par oxydation catalytique de la vapeur d'eau par les gaines de zirconium. Cette réaction a lieu lorsque la température excède ~ 1800 mm. La figure 9.13 présente, en fonction de la richesse, le nombre de Lewis effectif et ceux des réactifs O_2 et H_2 pris séparément de mélanges H_2/air pauvres (a) et riches (b).

D'après les valeurs des nombres de Lewis de ces mélanges, les mélanges riches sont pilotés par la diffusion de l' O_2 et caractérisés par un nombre de Lewis effectif proche de l'unité, faiblement décroissant avec la richesse. Alors que les mélanges pauvres sont pilotés par la diffusion de l' H_2 et caractérisés par un nombre de Lewis effectif très faible de l'ordre de ~ 0.3 et croissant avec la richesse. De plus, pour ces deux types de mélange, les nombres de Lewis propres à chaque espèce réactive sont distincts. La mise en place du phénomène de diffusion différentielle est alors assurée.

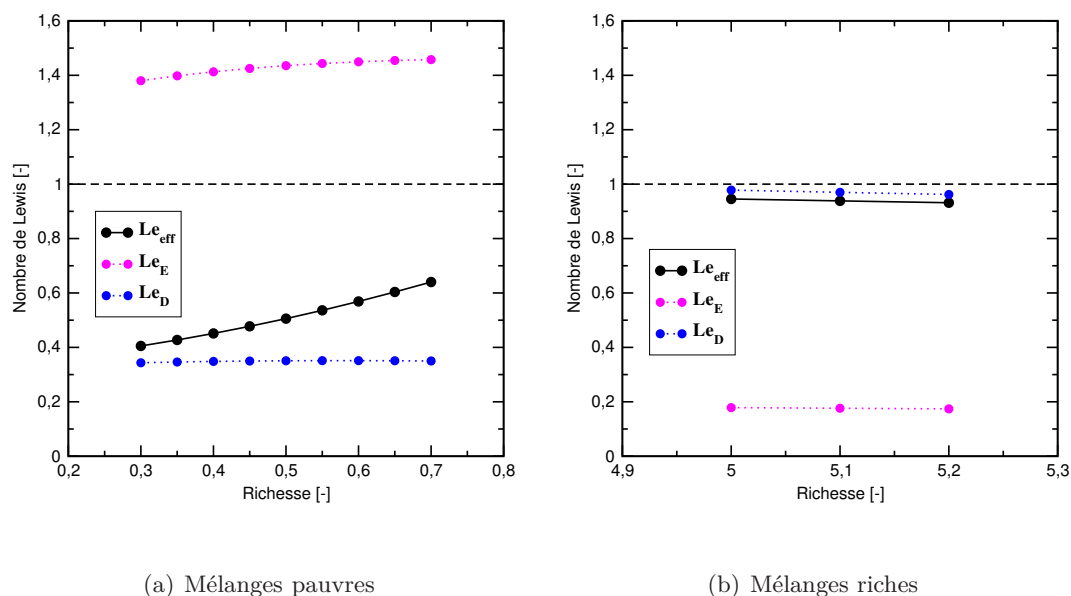


FIGURE 9.13 – Evolution en fonction de la richesse des nombre de Lewis caractéristiques (tous définis à la section 3.3.3) de mélanges H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

9.2.2 Résultats à pression atmosphérique

Les figures suivantes présentent l'évolution des profils temporels de température pour deux richesses caractéristiques $\phi = 0.5$ et $\phi = 5.2$. Pour rappel, l'estimation de la composition locale dans le volume de mesure est la difficulté majeure de cette technique de mesure optique. Pour estimer la section efficace de diffusion Rayleigh, l'hypothèse d'une combustion complète atteignant l'équilibre chimique est introduite. Un fichier répertoriant la section efficace en fonction de la richesse locale du mélange gaz brûlés a été réalisé. A partir de l'interprétation mécanique proposée par *Yang et al.* [190] et *Varea et al.* [44], une méthode itérative pour estimer la température de fin de combustion a été mise en place. Chaque profil de diffusion Rayleigh mesuré est traité en considérant deux états thermodynamiques : l'état gaz frais et l'état gaz brûlés. Tous deux sont caractérisés par une valeur moyenne de température sur l'intervalle de temps mesuré. La composition des gaz frais est fixée comme étant celle du mélange initiale et la composition des gaz brûlés est définie pour une richesse locale. Ainsi la section efficace de diffusion Rayleigh dans les gaz frais ne change pas et celle des gaz brûlés dépend de la richesse considérée. La méthode itérative mise en place consiste à déterminer la température pour une richesse locale, i.e. une section efficace donnée, et à la comparer à la température de fin de combustion de cette

même richesse calculée à l'équilibre. Cette technique permet d'évaluer la richesse locale lorsque les deux températures sont comparables à 40 K près. Soit une tolérance inférieure à 3 % dans les deux cas. A noter que pour chaque mélange et condition thermodynamique, un minimum de deux essais a été réalisé.

Pour les deux mélanges étudiés, les richesses locales estimées par ce post-traitement des signaux de diffusion Rayleigh sont :

- $\phi_{loc} = 0.56$ pour le mélange initialement à $\phi = 0.50$, soit une augmentation de ~ 12 % de la richesse
- $\phi_{loc} = 5.95$ pour le mélange initialement à $\phi = 5.20$, soit une augmentation de ~ 19 % de la richesse.

La figure 9.14 présente les deux profils de température en fonction du temps ainsi déterminés.

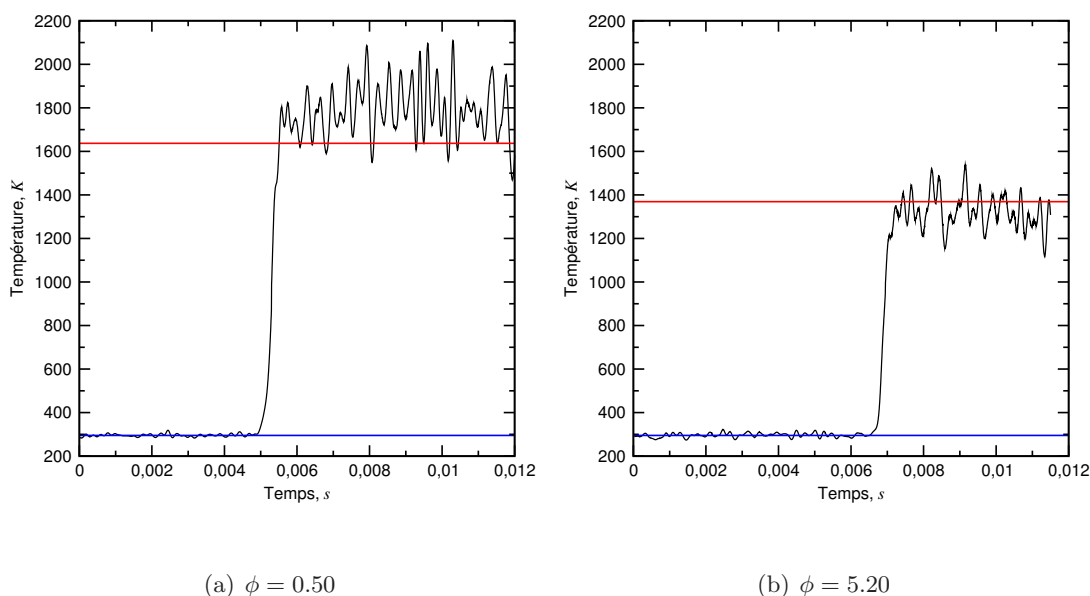


FIGURE 9.14 – Evolution du profil temporel de température pour deux mélanges H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression. La courbe bleue représente la température initiale du mélange et la rouge la température de fin combustion à l'équilibre chimique adiabatique pour un mélange conservant la richesse initiale.

Ainsi, pour ces deux mélanges la richesse locale estimée est supérieure à sa valeur initiale. Cette observation est en accord avec l'interprétation mécanique proposée par *Yang et al.* [190] et *Varea et al.* [44], pour laquelle la richesse locale est supérieure à la richesse initiale au niveau du front de flamme à cause de la plus grande diffusivité de l'hydrogène. La réactivité de la flamme est impactée en conséquence et la température de fin de combustion est modifiée. Pour le

mélange pauvre, cette modification est clairement identifiable et d'une intensité plus importante que l'incertitude de mesure telle que la température mesurée est supérieure à la température de fin combustion du même mélange pris à la richesse initiale. Au contraire, pour le mélange riche la température de fin de combustion est légèrement inférieure. Et cette faible différence est comparable en intensité à l'incertitude de mesure.

Dès lors, même si la variation de richesse locale est plus importante dans le cas d'un mélange H_2/air riche, la variation de température est quant à elle inférieure. La figure 9.15 présente en fonction de la richesse la température de fin de combustion calculée à l'aide d'un solveur adiabatique d'équilibre chimique. N.B : ce sont les valeurs qui sont répertoriées dans le fichier utilisé pour le post-traitement.

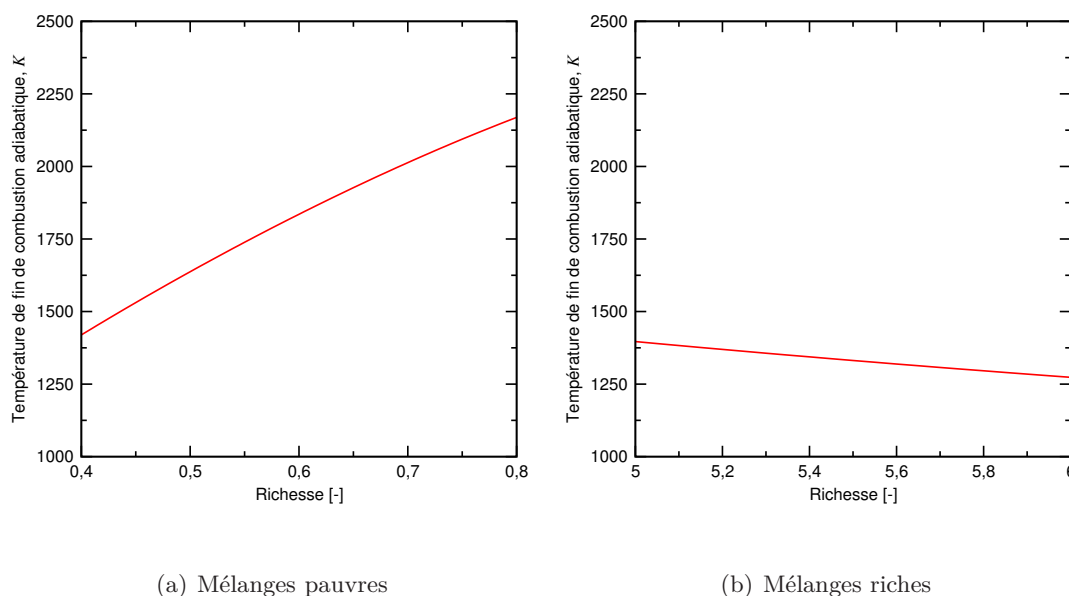


FIGURE 9.15 – Evolution en fonction de la richesse locale ϕ_{loc} de la température de fin de combustion adiabatique.

Pour analyser plus en détail les phénomènes de diffusion différentielle, des simulations numériques directes ont été réalisées sur des flammes H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ pour différentes conditions thermodynamiques. Cette richesse a été sélectionnée car elle est sujette à des modifications de sa richesse locale et de sa température de fin de combustion clairement mesurables. Le domaine de calcul de ces simulations reproduit le dispositif présent au laboratoire PRISME ayant servi aux mesures des profils de température par diffusion Rayleigh (cf Chap. 5). La simulation de chaque condition a été réalisée pour deux configurations : avec et sans prise en compte de la vitesse de diffusion induite par l'effet Soret afin de quantifier l'importance de cette diffusion

sur la propagation des flammes H_2/air sphériques. Elles ont été effectuées en collaboration avec le Pr. Z. Cheng de l'université de Pekin sur le code de simulation 1D $A - SURF$ (cf. Chap. 4). Le mécanisme réactionnel retenu est le mécanisme de *Keromnès* [73] et a été utilisé pour les différentes conditions thermodynamiques étudiées.

Pour permettre une comparaison directe entre les résultats numériques et expérimentaux sans introduire d'incertitude ou biais potentiels liés au post-traitement des mesures, des signaux de diffusion Rayleigh synthétiques normalisés par la valeur initiale ont été réalisés depuis les simulations. Ils sont produits à partir de l'extraction des données locales à une distance de 2 cm du point d'allumage pour correspondre aux réglages du dispositif expérimental. Ils sont calculés par l'équation :

$$S_{R,synth} = \frac{T^0}{T_{loc}} \sigma_N, \quad (9.4)$$

où $\sigma_{N,loc}$ est le rapport des sections efficaces de diffusion Rayleigh et défini par l'Eq. 5.10 :

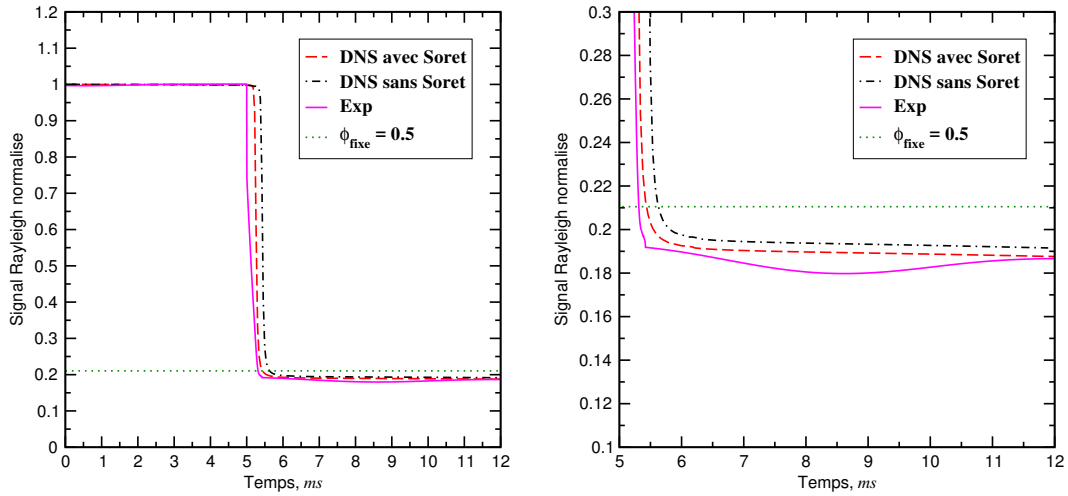
$$\sigma_N = \frac{\sum_j \chi_j \sigma_j}{\sum_i \chi_i \sigma_i}.$$

χ étant la fraction molaire et σ l'indice de réfraction molaire respectivement des espèces i présentes dans les gaz frais à l'état initial et j présentes au point d'extraction considéré dans les conditions P et T instantanées.

La figure 9.16 présente superposés sur un même graphique les signaux de diffusion Rayleigh expérimentaux et numériques déterminés pour une flamme H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression. La valeur du signal Rayleigh synthétique correspondant à la combustion d'un mélange à la richesse fixe $\phi = 0.5$ est aussi représentée par une droite en pointillées. Le signal expérimental présenté a quant à lui subi un filtrage numérique à 200 Hz (cf Sec. 5.2.2.4) pour réduire au minimum le bruit de mesure et extraire sa tendance.

Cette figure démontre que la prise en compte de la diffusion préférentielle est nécessaire pour les flammes H_2/air . En effet, les deux simulations DNS donnent des signaux Rayleigh côté gaz brûlés différents de celui correspondant à la richesse fixe $\phi = 0.5$, tel que la valeur du signal soit inférieure. Cela correspond à une température de fin de combustion supérieure dans les deux cas. De plus, en comparant les deux simulations DNS entre elles : deux impacts associés et dus à la prise compte des effets de diffusion de Soret sont clairement identifiables :

- la flamme est plus lente lorsque les effets de diffusion de Soret ne sont pas considérés puisque le passage du front de flamme au rayon $R_{mesure} = 2\text{ cm}$ est à $t = 5.5\text{ ms}$ avec



(a) Intégralité du signal

(b) Zoom dans la zone gaz brûlés

FIGURE 9.16 – Evolution des profils temporels de diffusion Rayleigh expérimentaux et synthétiques d’une flamme H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression.

ces effets de diffusion de Soret alors qu’il s’effectue 0.5 ms plus tard, à $t = 6.0\text{ ms}$, s’ils sont négligés.

- la température de fin de combustion est supérieure lorsque les effets de diffusion de Soret sont considérés puisque le signal correspondant est inférieur au signal sans.

A partir des profils de concentration des espèces, l’estimation de la richesse locale moyenne ϕ_{loc} dans les gaz brûlés de ces deux simulations est possible. Lorsque les effets de diffusion de Soret sont considérés, elle est de $\phi_{loc} = 0.542$ alors qu’elle est de 0.527 s’ils ne le sont pas. Une fois de plus, cette observation est en accord avec l’interprétation mécanique des effets de diffusion différentielle de *Yang et al.* [190] et *Varea et al.* [44].

Enfin, la comparaison entre les signaux numériques et celui issu de l’expérience montre qu’un bon accord existe entre la mesure et la simulation incorporant les effets de diffusion de Soret. Ce résultat démontre la capacité des codes de simulation numérique directe à reproduire des flammes réelles dans une géométrie particulière et complexe. Mais aussi la nécessité de prendre en compte tous les phénomènes de diffusion, Fick et Soret, lorsque des espèces légères, comme H_2 ou H , sont utilisées et que les nombres de Lewis propres des espèces réactives sont fortement différents les uns des autres.

Afin d’étudier l’impact que peut avoir ces effets de diffusion sur la capacité à mesurer expéri-

mentalement la vitesse de combustion laminaire, la figure 9.17 présente en fonction de l'étirement du front de flamme l'évolution des trois vitesses : S_c , $\tilde{S}_{d,b}$ et $\tilde{S}_{d,u}$. Leur extrapolation linéaire propre est représentée par une droite en pointillés et la valeur à étirement nul est comparée à la valeur S_l^0 calculée par la simulation. Il faut noter que l'intervalle de mesure a été réduit d'après les recommandations de *Varea et al.* [44]. Leurs travaux, alliant résultats numériques et expérimentaux, montrent que la gamme de rayons exploitables où le front de flamme du mélange combustible H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ se propage de manière laminaire sans cellularité ou influence de l'allumage se limite entre $R_f = 0.8$ et 1.4 cm dans ces conditions thermodynamiques.

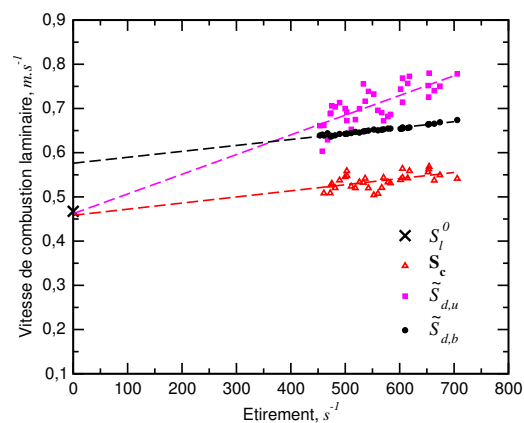


FIGURE 9.17 – Superposition des différentes définitions de la vitesse de combustion laminaire et de leurs extrapolations linéaires respectives pour une flamme expérimentale H_2/air à la richesse $\phi = 0.5$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression.

Cette figure montre que les deux vitesses S_c et $\tilde{S}_{d,u}$ estiment une valeur de vitesse extrapolée linéairement à étirement nul très proche de la valeur S_l^0 issu d'une simulation 1D. Ces deux définitions de la vitesse de combustion laminaire étirée ne font appel à aucune hypothèse ou approximation qui ne se vérifie sur cette flamme d' H_2/air . Au contraire, l'extrapolation à étirement nul de la vitesse $\tilde{S}_{d,b}$, définie avec une densité des gaz brûlés issue d'un calcul simple d'équilibre chimique à la richesse initiale du mélange est supérieure à la valeur de S_l^0 . Ce résultat démontre que pour effectuer une mesure directe de la vitesse de combustion laminaire sur des mélanges soumis à des effets de diffusion différentielle, les deux modèles S_c et $\tilde{S}_{d,u}$ sont les plus adaptés.

La prise en compte des effets de diffusion préférentielle est intrinsèque dans leur définition. La vitesse $\tilde{S}_{a,b}$ nécessite quant à elle d'estimer avec une plus grande précision la masse volumique caractéristique des gaz brûlés dans cette gamme de mesure où les effets de compression dans la chambre peuvent être négligeables. Seul un calcul DNS est capable d'améliorer cette estimation. Mais il nécessite l'utilisation d'un schéma cinétique valide pour le combustible et les conditions thermodynamiques étudiées. Or la validation de schéma cinétique est l'un des buts premiers de la mesure de la vitesse de combustion laminaire.

9.2.3 Perspectives de résultats pour des conditions sub-atmosphériques

Les dispositifs d'étude nucléaire, tel que le tokamak du projet ITER (International Thermonuclear Experimental Reactor), présentent des dangers importants en terme d'explosion du fait de la présence d'hydrogène lors d'un scénario de fuite. En effet, ces enceintes sont caractérisées par des pressions internes inférieures à la pression atmosphérique et l'introduction par une faille d'air extérieur peut provoquer la formation de mélanges H_2/air . L'étude des risques d'explosion de ces installations est de première importance et doit s'orienter vers l'étude de la combustion de mélanges en conditions sub-atmosphériques [4, 191].

La figure 9.18 présente en fonction de pressions initiales sub-atmosphériques la différence normalisée entre la température de fin de combustion moyennée au point de mesure P, placé à une distance $R = 20 \text{ mm}$ du point d'allumage, et la température de fin de combustion d'un calcul adiabatique à l'équilibre thermodynamique d'un mélange H_2/air à la température ambiante dont la richesse est fixée à $\phi = 0.5$. Cette richesse a été sélectionnée pour les mêmes raisons que précédemment.

La comparaison entre les résultats expérimentaux et numériques ne montre pas de superposition, quelle que soit la méthode utilisée pour résoudre la diffusion. Cette différence peut s'expliquer par le fait que le schéma cinétique sélectionné n'est pas nécessairement le plus adapté pour reproduire les expériences. En revanche, la tendance d'évolution en fonction de la pression des simulations prenant en compte la diffusion de Soret présente un bon accord avec celle des mesures. Cette évolution est non linéaire telle que l'écart entre la température adiabatique et mesurée (ou simulée par DNS) est le plus important pour les faibles pressions puis diminue avec la pression. Au contraire, l'évolution de cette différence pour les simulations sans résolution de la diffusion de Soret présente un comportement décroissant quasi-linéaire avec la pression.

Le nombre de Lewis variant peu avec la pression, ces résultats démontrent l'importance de

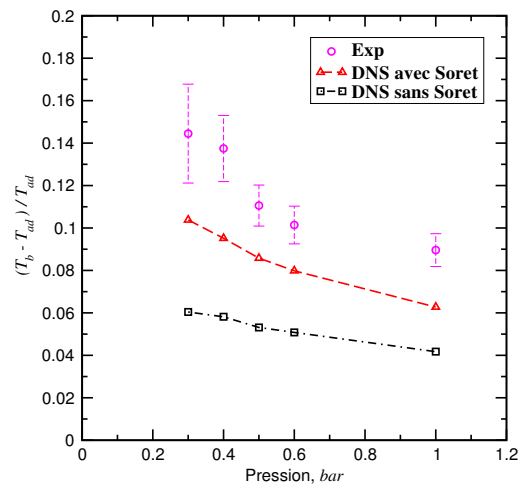


FIGURE 9.18 – Différence normalisée entre la température de fin de combustion moyennée T_b et la température de fin de combustion d'un calcul adiabatique à l'équilibre thermodynamique d'un mélange H_2/air en fonction de pressions sub-atmosphériques.

prendre en compte la diffusion de Soret pour ce type de mélanges combustibles comportant des espèces réactives très légères lorsque la pression diminue afin de résoudre précisément la réaction chimique. Ces observations, basées sur la température de fin de combustion en fonction de la pression, sont en accord avec les observations faites sur la vitesse de propagation du front de flamme en fonction de la pression par *Dayma et al.* [22].

9.2.4 Conclusion

Au final, contrairement à ce qui a été observé pour les effets de transfert radiatif d'énergie thermique, le phénomène de diffusion préférentielle est clairement identifiable dans la gamme de rayons de flamme classiquement exploités expérimentalement. La mesure de profils temporels ponctuels de température a mis en évidence une température de fin de combustion différente de celle calculée par un solveur d'équilibre chimique adiabatique. L'interprétation mécanique de *Yang et al.* [190] et *Varea et al.* [44] dénote une augmentation de la richesse locale au passage du front de flamme que ce soit pour des mélanges initialement pauvres ou très riches. L'étude expérimentale de ce type de flammes nécessite la mise en place de diagnostics spécifiques, donnant accès directement aux grandeurs caractéristiques. En effet, les deux vitesses S_c et $\tilde{S}_{d,u}$ ont montrées un bon accord sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire extrapolée

linéairement à étirement nul entre elles et par comparaison avec la simulation 1D. La définition de $\tilde{S}_{d,b}$ ne permet pas d'estimer avec une bonne précision la vitesse de combustion laminaire S_l^0 autrement qu'en introduisant les résultats d'un calcul DNS pour corriger la valeur de la densité dans les gaz brûlés. De plus, la comparaison entre des signaux de diffusion Rayleigh mesurés et construits depuis des simulations numériques a démontré qu'il était nécessaire de réaliser une résolution précise et complète de toutes les composantes (Fick + Soret) de la diffusion des espèces. Et ce particulièrement pour les espèces légères comme le radical H ou la molécule H_2 qui agissent dans les réactions élémentaires de la combustion des mélanges H_2/air .

Enfin, les résultats d'une flamme H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ pour des conditions de pression sub-atmosphériques ont démontré l'importance grandissante des effets de diffusion préférentielle avec la diminution de la pression. Les études sur ce type de mélange, qu'elles soient expérimentales ou numériques doivent alors identifier clairement ces effets ou bien en tenir compte sur l'analyse de leurs résultats.

9.3 Analyse des modèles d'extrapolation à étirement nul

Les résultats présentés dans cette section résultent d'une collaboration internationale avec l'équipe du Pr. *F.N. Egolfopoulos*, de l' University of Southern California (U.S.A). Ils ont été publiés au 35^{ème} Symposium International de Combustion [192].

Comme il a été énoncé dans le chapitre 3, les flammes réelles sont définies sur des configurations de flammes étirées et l'introduction d'un modèle d'extrapolation des vitesses mesurées à étirement nul est donc nécessaire pour définir la vitesse de combustion laminaire S_l^0 . Pour la configuration de flamme sphérique, où l'étirement est défini par $\kappa = \frac{2}{R} \frac{dR}{dt}$, on peut citer deux formes de modèle d'extrapolation. Le premier établit une relation linéaire entre la vitesse de combustion laminaire S_l^0 et les vitesses mesurées. Il s'agit de l'équation 3.30 présentée précédemment. Mais les études de *Kelley & Law* [86, 87], *Halter et al.* [88] ou encore *Chen* [89], basées sur les travaux théoriques de *Ronney & Shivashinsky* [90], ont démontré que pour les mélanges dont le nombre de Lewis est différent de l'unité, la vitesse de propagation absolue S_f varie non-linéairement avec l'étirement dans les gammes de rayons classiquement mesurés et ont proposés une relation d'extrapolation non-linéaire, l'Eq. 3.34.

Cependant, les récents travaux numériques de *Jayachandran et al.* [67] ont démontré à partir de simulations numériques directes que même l'équation d'extrapolation non-linéaire peut induire une forte incertitude sur l'estimation de la LBV pour les mélanges caractérisés par de forts effets du nombre de Lewis ou de diffusion préférentielle. Ils ont par ailleurs aussi mis en évidence que la vitesse de déplacement des gaz frais, $\tilde{S}_{d,u}$, était insensible à la modélisation du rayonnement thermique.

La précision des valeurs de la LBV étant primordiale pour permettre une bonne validation des schémas cinétiques ou des simulations numériques réalistes (cf Chap. 8), il est important de pouvoir estimer précisément les incertitudes de mesure ou de définir une nouvelle méthode d'estimation de la LBV, comme proposée au Chap. 8. Une autre possibilité serait de revoir la méthodologie de validation d'un schéma cinétique, mais elle n'est pas explorée dans ces travaux.

L'étude de l'impact des modèles d'extrapolation de l'étirement du front de flamme sur l'incertitude liée à l'estimation de la vitesse de combustion laminaire est ici réalisée avec l'introduction d'une nouvelle approche de comparaison directe entre des résultats expérimentaux obtenus

aux laboratoires *CORIA* et des résultats issus de simulations numériques directes reproduisant la configuration de flamme du dispositif expérimental. Ce dispositif expérimental, présenté au chapitre 6, permet de mesurer les deux vitesses de déplacement caractéristiques $\tilde{S}_{d,b}$ et $\tilde{S}_{d,u}$, respectivement du côté des gaz brûlés et des gaz frais du front de flamme. Les simulations ont été réalisées à l'aide du code numérique *TORC* présenté dans le chapitre 4 pour une flamme 1D sphérique laminaire se propageant dans un large domaine de rayon $R_0 = 100 \text{ cm}$. Les effets de compression des gaz frais ne sont donc pas pris en compte dans ces simulations sur la gamme de rayons de flamme étudiés ($10 < R_f < 20 \text{ mm}$) et seule la géométrie du front est respectée.

9.3.1 Mélanges retenus pour l'étude

Afin de mettre en avant au maximum l'impact de l'extrapolation à étirement nul sur l'estimation de la LBV, il a été choisi de réaliser une étude sur deux types carburants, gazeux et liquide, dont les nombres de Lewis sont différents de l'unité. Néanmoins, pour des raisons techniques le carburant liquide est préchauffé puis brûlé sous forme gazeuse à une température de $T = 373 \text{ K}$. C'est le n-heptane, $n - C_7H_{16}$, qui a été sélectionné pour représenter ces carburants, caractérisés par de longues chaînes carbonées. Il forme avec de l'air ambiant ($\sim 21\% O_2$) des mélanges combustibles dont le nombre de Lewis effectif (Eq. 3.11, défini à la section 3.3.3) est supérieur à 1, comme représenté en fonction de la richesse sur la figure 9.19(a). Il est couramment employé comme carburant de substitution des combustibles de type essence employés dans le secteur du transport. Le second combustible sélectionné est l'éthylène, C_2H_4 . Sa combustion avec de l'air ambiant se caractérise par de forte vitesse de combustion. Ainsi, pour réduire sa vitesse à celle observable sur des mélanges $n - alkane/air$ classique autour de 40 cm/s et limiter les incertitudes de mesure, c'est le mélange $C_2H_4/(0.167O_2 + 0.833N_2)$ qui a été retenu. L'évolution du nombre de Lewis effectif de ce mélange en fonction de la richesse est représentée sur la figure 9.19(b).

Les mesures effectuées sur ces deux carburants ont été réalisées pour une large plage de richesses telle que : $0.7 < \phi < 1.4$, à la pression atmosphérique : $P = 1 \text{ atm}$. Les températures initiales associées à chaque carburant sont en revanche différentes telles que : $T_{n-C_7H_{16}} = 373 \text{ K}$ pour permettre l'évaporation du combustible et $T_{C_2H_4} = 298 \text{ K}$, la température ambiante. Pour chacune des conditions étudiées, cinq tests sont réalisés pour démontrer la forte répétabilité des mesures et augmenter le poids statistique des résultats. Les modèles d'extrapolation sont appliqués pour chaque condition sur l'ensemble des résultats expérimentaux superposés. C'est

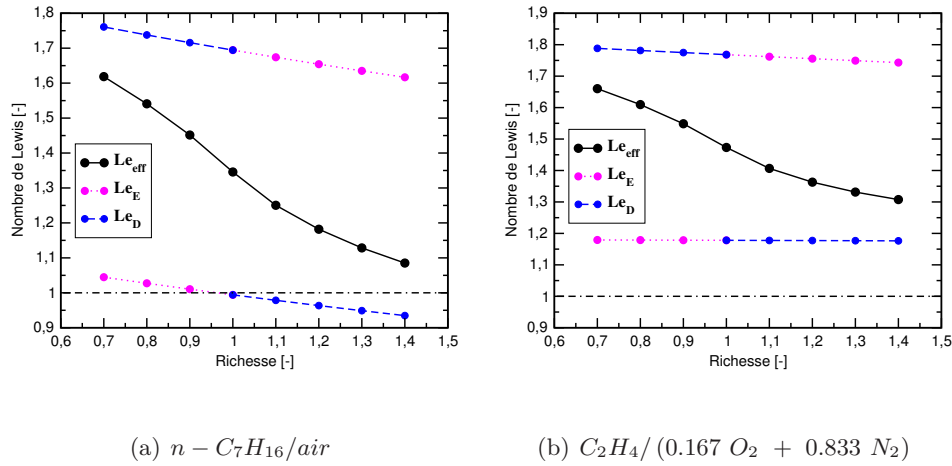


FIGURE 9.19 – Evolution en fonction de la richesse des nombres de Lewis effectifs, du réactif en déficit et du réactif en excès (tous définis à la section 3.3.3), à pression atmosphérique des deux mélanges $n - C_7H_{16}/air$ et $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$, respectivement à $T = 373 K$ et $T = 298 K$.

le même ensemble de points qui est comparé de manière directe avec les simulations DNS

9.3.2 Nouvelle approche : comparaison directe mesures/simulations numériques

Les figures 9.20 et 9.21 présentent l'évolution en fonction de l'étirement des vitesses de propagation absolue S_f (a) et d'entrée des gaz frais dans le front de flamme u_g (b) pour les mélanges $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$ et $n - C_7H_{16}/air$ respectivement. Sur ces figures sont représentés par des symboles les résultats expérimentaux et par des courbes les données numériques. Les deux modèles possibles pour simuler les transferts thermiques radiatifs dans le code *TORC* ont été utilisés (cf Chap. 4). L'approche adiabatique (ADB) est représentée par une courbe en trait plein et l'approche Optiquement Mince (OTM) est représentée en traits pointillés.

Les résultats numériques présents sur ces figures démontrent que sur la gamme de rayons mesurés expérimentalement le modèle de rayonnement thermique n'a pas d'influence significative sur les deux vitesses S_f et u_g pour ces deux carburants quelle que soit la richesse considérée. De plus, ces simulations sont comparables avec les résultats expérimentaux correspondants que ce soit sur les vitesses ou leur longueur de Markstein associée, représentant la sensibilité de la

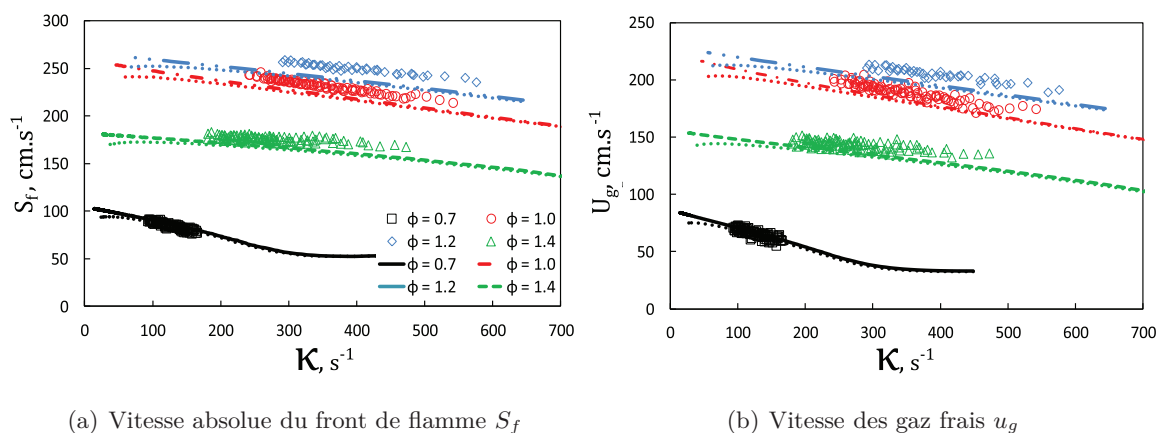


FIGURE 9.20 – Superposition de résultats numériques et expérimentaux des vitesses caractéristiques S_f et u_g de flammes C_2H_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.

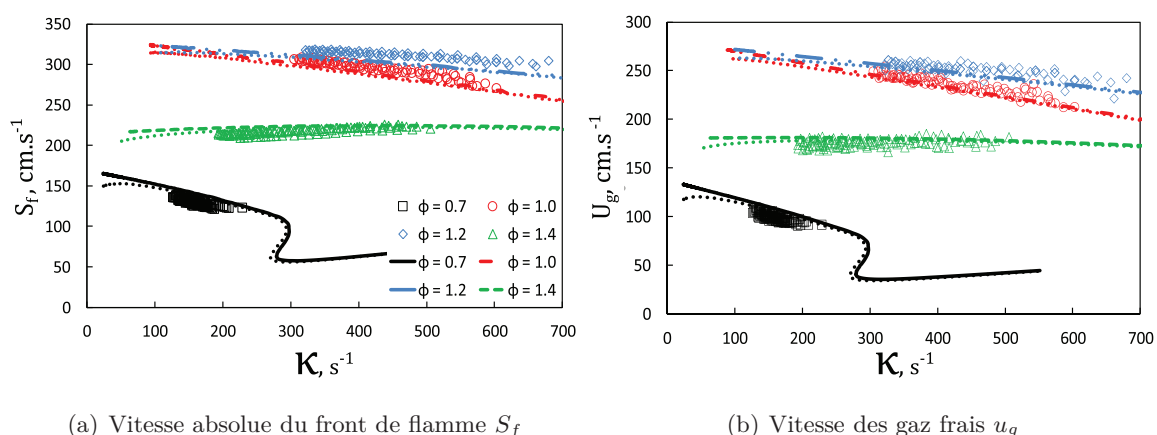


FIGURE 9.21 – Superposition de résultats numériques et expérimentaux des vitesses caractéristiques S_f et u_g de flammes $n - C_7H_{16}/air$ à pression atmosphérique et $T = 373 K$.

flamme à l'étirement et correspondant directement à la pente des courbes. Ce bon accord est illustré sur la figure 9.22 qui présente la différence et l'écart-type entre les résultats numériques et expérimentaux en fonction de la richesse de ces deux vitesses et $\tilde{S}_{d,u} = S_f - u_g$.

La différence ne dépasse pas 10% dans le pire des cas pour la vitesse u_g . Cette valeur est de l'ordre de grandeur de l'incertitude globale de la mesure expérimentale de cette vitesse effectuée sur le dispositif expérimental.

Ainsi ces observations permettent de conclure que l'utilisation d'un modèle d'extrapolation à étirement nul pour analyser des résultats expérimentaux et définir des paramètres de valida-

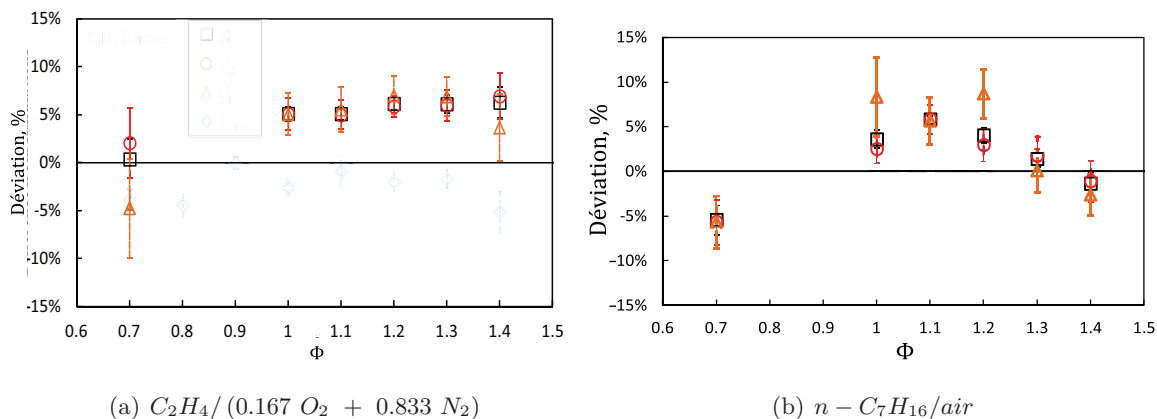


FIGURE 9.22 – Différence moyenne et écart-type entre les résultats numériques et expérimentaux sur les vitesses de flamme S_f , u_g et leur différence $\tilde{S}_{d,u}$ pour les deux mélanges étudiés. Représentation : \square : S_f , \circ : u_g et \triangle : $\tilde{S}_{d,u}$.

tion pour les schémas cinétiques n'est pas la seule méthode. Il est possible de réaliser à l'aide de simulations DNS, reproduisant la configuration expérimentale de flamme, des comparaisons directes expériences / simulations. Deux résultats importants de la littérature sont à noter ici :

1. Même si les deux mélanges utilisés dans cette étude ne sont pas soumis à des effets de ré-absorption, la définition de la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ a été qualifiée d'indépendante aux effets d'échanges par rayonnement d'énergie thermique dans [67] et permet donc de pouvoir étendre cette approche de validation à d'autres mélanges sur des simulations DNS sans nécessiter de modélisation le rayonnement pour maîtriser leur coût et leur temps de calcul.
2. L'ensemble des modèles d'extrapolation à étirement nul repose sur l'hypothèse de flamme adiabatique, or *Xiouris et al.* [45] ont montré que négliger les effets du rayonnement peut introduire une incertitude allant jusqu'à 15% sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire dans leur étude sur la détermination de cette vitesse pour des conditions thermodynamiques réalistes pour des gaz synthétique, dont la carburant se compose d'un mélange $H_2 + CO$.

9.3.3 Incertitudes liées aux modèles d'extrapolation

La section précédente a présenté qu'il était possible d'utiliser des résultats expérimentaux sans utiliser de modèles d'extrapolation à étirement nul. Néanmoins, la réalisation de simulations numériques directes est coûteuse et il reste donc intéressant de déterminer directement à partir de mesures la LBV. Mais dans ce cas, il est primordiale d'exprimer clairement son incertitude.

Cette section présente dans un premier temps la comparaison entre la vitesse de combustion laminaire estimée à partir de l'extrapolation à étirement nul des données numériques et les résultats obtenus avec le code *Premix* [12] donnant par calcul 1D directement la valeur de S_l^0 en utilisant le même schéma cinétique que les DNS. Elle a pour but d'analyser les modèles d'extrapolation et leurs conditions (carburant, thermodynamique...) d'application. Les erreurs liées à l'extrapolation linéaire, Eq. 3.30, ou non-linéaire, Eq. 3.34, sont représentées sur les figures 9.23 et 9.24 en fonction de la richesse pour les deux carburants dans deux intervalles de rayons différents :

1. Intervalle 1 : de $1 < R_f < 2 \text{ cm}$, comparable à un intervalle de données mesurées expérimentalement (cf. Chap. 6) et
2. Intervalle étendu 2 : de $1 < R_f < 6 \text{ cm}$, accessible uniquement avec la simulation pour conserver la flamme stable laminaire pour de grands rayons de flamme.

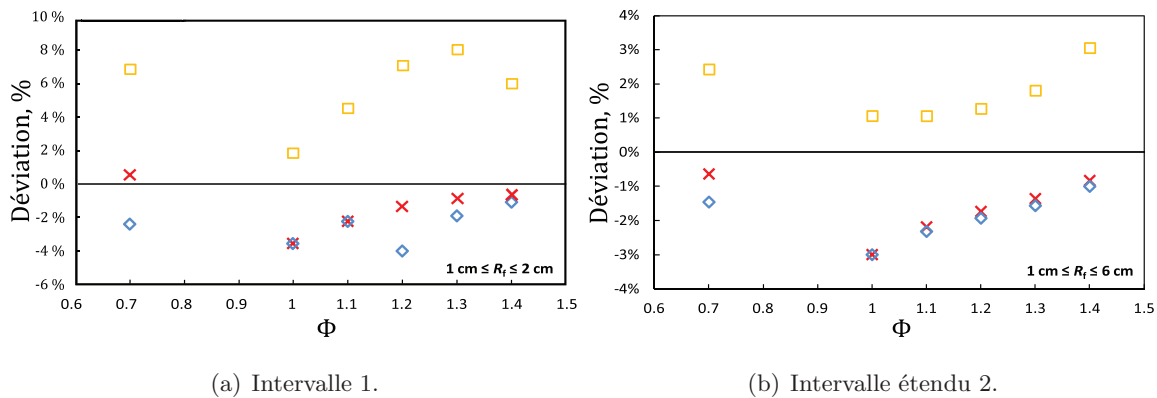


FIGURE 9.23 – Différence entre la valeur calculée avec *Premix* de S_l^0 et la valeur extrapolée à étirement nul des résultats numériques pour deux intervalles de rayons du mélange $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$ en fonction de la richesse. Représentation : **X** : extrapolation linéaire de S_f , \diamond : extrapolation non-linéaire de S_f et \square : extrapolation non-linéaire de $\tilde{S}_{d,u}$.

En considérant premièrement l'intervalle 1, les résultats sur le mélange $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$ montrent que le modèle d'extrapolation linéaire et le modèle d'extrapolation non-linéaire donnent des résultats comparables de la vitesse de combustion laminaire S_l^0 . Ces deux modèles présentent de plus une très faible différence comparée à la valeur d'un calcul 1D avec un maximum pour la flamme stoechiométrique de 4%. On peut noter tout de même que pour la plupart des richesses, le modèle linéaire est plus proche de la valeur 1D. La valeur estimée par le modèle non-linéaire est soit égale soit inférieure. Les résultats

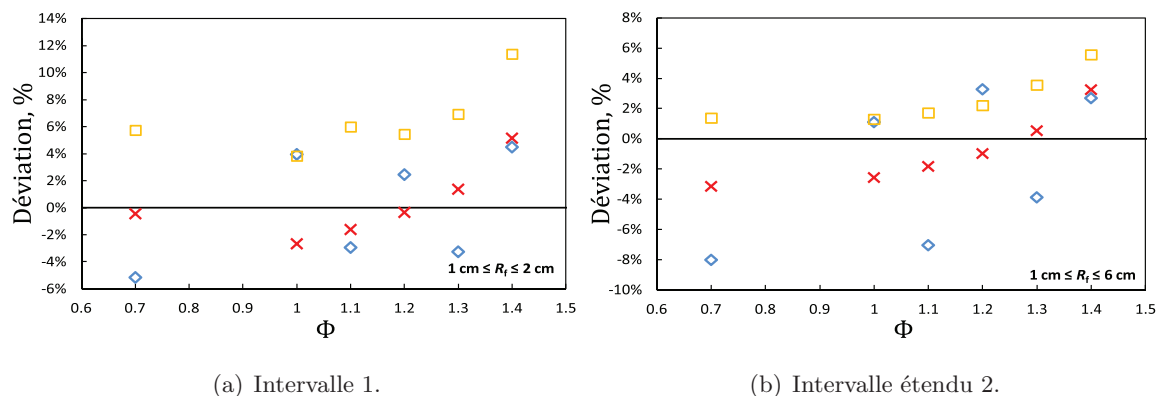


FIGURE 9.24 – Différence entre la valeur calculée avec *Premix* de S_l^0 et la valeur extrapolée à étirement nul des résultats numériques pour deux intervalles de rayons du mélange $n-C_7H_{16}/air$ en fonction de la richesse. Représentation : X : extrapolation linéaire de S_f , \diamond : extrapolation non-linéaire de S_f et \square : extrapolation non-linéaire de $\tilde{S}_{d,u}$.

confirment donc le comportement linéaire avec l'étirement de la vitesse de propagation S_f pour les flammes C_2H_4 dans cette gamme [67].

Pour le mélange $n-C_7H_{16}/air$, les constatations sont équivalentes dans cet intervalle de rayons, avec une valeur maximale de la différence à étirement nul de 5%, telle que l'extrapolation sous-estime la vitesse S_f à $\phi = 0.7$ pour le modèle non-linéaire et la sur-estime pour les deux modèles à $\phi = 1.4$. A la richesse $\phi = 0.7$, comme pour le mélange $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$, la vitesse de flamme est supposée avoir un comportement linéaire qui se retrouve d'après les résultats extrapolés de [67]. De plus, à cette richesse où $Le_{eff} > 1$, la perte thermique depuis la zone de réaction du front de flamme ne peut pas être contre balancée par un gain local de carburant et provoque une réduction du taux de réaction de la combustion [193]. Néanmoins, à la richesse $\phi = 1.4$ les résultats de l'extrapolation ne peuvent pas s'expliquer par des effets de diffusion préférentielle puisque Le_{eff} tend vers l'unité. L'impact de l'extrapolation n'est alors pas explicite pour cette condition.

En revanche, l'extrapolation de la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ se caractérise par une sur-estimation supérieure à 5% quelle que soit la richesse pour ces deux mélanges, telle que l'extrapolation est la plus précise proche de la stoechiométrie puis se dégrade en augmentant ou diminuant la richesse. En effet, $\tilde{S}_{d,u}$ est soumise à la géométrie du front de flamme et aux effets de dilatation thermique qui ne sont pas pris en compte dans le développement des modèles d'extrapolation.

A partir des mêmes figures, l'étude sur l'intervalle étendu 2 permet de mettre en avant l'influence de l'intervalle de données sur la précision des modèles d'extrapolation. Les résultats démontrent que pour les deux modèles d'extrapolation, les différences à étirement nul des vitesses de flammes diminuent avec cet intervalle comportant plus de données. Notamment sur l'estimation de $\tilde{S}_{d,u}^0$ où la différence avec le calcul 1D est divisé par deux.

Ainsi, ces résultats numériques démontrent que l'extension de l'intervalle exploité augmente la précision des valeurs extrapolées. L'utilisation d'une cellule de mesure de grande taille pour effectuer des mesures est donc à favoriser, dans la limite où l'exploitation des résultats doit s'arrêter à partir du moment où les instabilités apparaissent. Le gain sur l'intervalle exploitable sera donc fonction du mélange étudié et pourra même être nul, comme pour les flammes H_2/air où ces instabilités apparaissent dès $R_f = 1.5 \text{ cm}$ [44].

La figure 9.25 présente la différence entre la valeur de S_f^0 déterminée avec *Premix* et la valeur extrapolée à étirement nul des résultats expérimentaux. Même si les résultats présentés dans

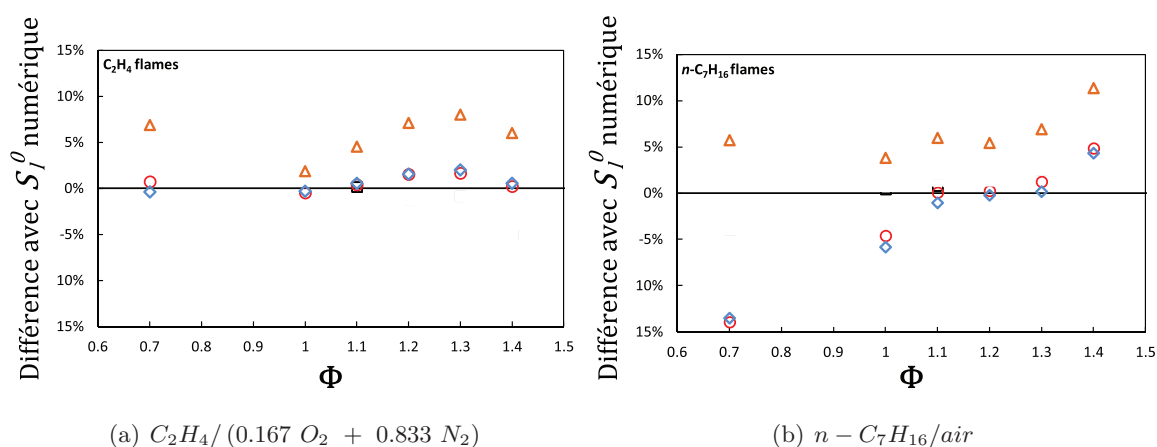


FIGURE 9.25 – Différence entre la valeur calculée avec *Premix* de S_f^0 et la valeur extrapolée à partir des mesures expérimentales des deux mélanges étudiés en fonction de leur richesse. Représentation : \circ : extrapolation linéaire de S_f , \diamond : extrapolation non-linéaire de S_f et \triangle : extrapolation non-linéaire de $\tilde{S}_{d,u}$.

cette figure sont équivalents à ceux issus du traitement numérique, il n'est pas possible d'établir les mêmes conclusions car l'extrapolation présentée ici doit prendre en compte l'incertitude inhérente liée aux mesures. En effet, les mesures expérimentales présentent les résultats sous forme d'un nuage de point en fonction de l'étirement et l'extrapolation de ce nuage de point induit inévitablement une incertitude supplémentaire à la simple influence du modèle d'étirement.

C'est pourquoi il est nécessaire dans ce cas de définir clairement l'incertitude de mesure qui s'additionne à l'incertitude liée à l'extrapolation qui a été exprimée précédemment.

9.3.4 Conclusion

Pour conclure, cette étude alliant résultats expérimentaux et numériques a permis de mettre en avant l'impact des modèles d'extrapolation à étirement nul pour l'exploitation de mesures expérimentales. L'analyse à partir des résultats numériques a démontré que l'introduction d'incertitude est inhérente à leur utilisation et que leur précision est fonction de l'intervalle de données exploitées, en terme de rayons de flamme observées. De plus, ils ont démontré que l'emploi d'un modèle linéaire ou non-linéaire est fonction du mélange, mais pas nécessairement uniquement sélectionnable en fonction du nombre de Lewis du mélange combustible étudié. Pour ces mélanges, le modèle d'extrapolation linéaire a notamment montré une différence plus importante comparé aux valeurs 1D que le modèle non linéaire. En effet, les modèles d'extrapolation font appel dans leur développement à des hypothèses et simplifications qui peuvent ne pas être appropriées pour déterminer avec précision des paramètres cinétiques de la flamme, tels que le taux de réaction global de la combustion lié à S_l^0 . L'introduction d'erreurs par leur utilisation est intrinsèque.

C'est pourquoi une nouvelle approche a été utilisée et validée dans cette étude. Elle consiste à faire une comparaison directe entre les mesures expérimentales et des simulations DNS reproduisant la configuration de flamme expérimentale. Elle permet ainsi de se soustraire des effets des modèles d'extrapolation et/ou de l'introduction d'une correction du saut de densités par l'expression du facteur d'expansion au passage du front de flamme. Néanmoins, ces outils de simulation numérique sont très complexes et nécessitent de conséquentes ressources en temps et capacités de calcul.

Dans les cas où l'utilisation d'un modèle d'extrapolation est préférée pour estimer la LBV, il est nécessaire d'exprimer clairement l'incertitude liée aux mesures pour la relier à l'incertitude induite par l'extrapolation. Elle pourra notamment être déterminée comme exprimée dans les récents travaux de *C. Xiouris, F.N. Egolfopoulos et al.* [45] par la somme quadratique de l'incertitude de l'ensemble des paramètres pouvant impacter les mesures.

Quatrième partie

Conclusion, perspectives et annexes

Conclusion

Depuis plusieurs années, les problématiques liées au changement climatique, aux émissions polluantes associées à la combustion, la pénurie annoncée des énergies fossiles et l'émergence de nouveaux combustibles et procédés de combustion pour y pallier, sont devenues prépondérantes dans notre société. Elles nécessitent toutes de pouvoir caractériser avec précision le processus de combustion. Cette caractérisation s'illustre à l'aide de la chimie de la réaction de combustion, représentée par la construction de schémas cinétiques. Ces derniers nécessitent pour être validés l'évaluation de plusieurs paramètres dont la vitesse de combustion laminaire.

Cette vitesse de combustion laminaire est un paramètre fondamental, défini pour une flamme idéale 1D plane non étirée. Mais sa détermination expérimentale précise reste un défi quels que soient le dispositif et la configuration de flamme réelle associée employés. C'est dans ce contexte de caractérisation des moyens expérimentaux de mesure de cette vitesse de combustion laminaire que s'inscrivent ces travaux de thèse.

La première partie de ce manuscrit a été consacrée à la définition des différents paramètres caractéristiques des flammes de prémélanges, dans la configuration d'une flamme idéale 1D plane non étirée, puis pour la géométrie de flamme réelle en expansion sphérique. Cette configuration de flamme a été sélectionnée car elle permet d'atteindre des conditions, en terme de pression et de température initiales avant combustion, caractéristiques des moteurs utilisés dans les domaines du transport ou de la production d'énergie, qui sont complexes à réaliser avec des configurations de flammes stationnaires. L'ensemble des paramètres ont été redéfinis pour cette géométrie et les difficultés propres à leur mesure présentées.

La seconde partie s'est intéressée à présenter les différents outils, numériques et expérimentaux mis en oeuvre au cours de ces travaux. Les outils numériques, au nombre de trois,

ont été utilisés grâce à la mise en place de plusieurs collaborations internationales. Ils sont, à l'heure actuelle, parmi les plus précis et pertinents pour l'étude des flammes en expansion sphérique et de ses paramètres. Ils ont permis de reproduire numériquement les deux dispositifs expérimentaux, présents aux laboratoires PRISME et CORIA, aussi utilisés au cours de cette thèse. En conclusion de cette partie, une étude complète sur les capacités et la précision des dispositifs de mesures a été présentée. Elle résulte d'une collaboration européenne entre quatre laboratoires : le CORIA UMR-6614, Rouen ; PRISME UPRES-4229, Orléans ; ICARE UPR-3021, Orléans et ITV, RWTH Aachen, Allemagne. L'ensemble des sources d'incertitudes sur les mesures brutes : préparation du mélange, répétabilité, dérive, extraction du contour de flamme et expression du rayon de flamme, ont pu être évaluées par comparaison directe entre les résultats. Les résultats de cette étude ont montré une bonne homogénéité des mesures brutes de l'ensemble des quatre dispositifs. La problématique du post-traitement des données extraites par mesures a dès lors été clairement exposée. L'ensemble des vitesses mesurées sur les dispositifs expérimentaux forme des nuages de points utilisés pour estimer la vitesse de combustion laminaire S_l^0 . Mais alors l'introduction de modèle d'extrapolation à étirement nul représente un post-traitement possiblement sujet à de fortes incertitudes.

Enfin la troisième partie a été divisée en deux chapitres. Le premier a montré l'étude de la définition et de la mesure de la vitesse de consommation, définie à partir de l'intégrale du taux de réaction d'une espèce quelconque k , réactive ou produite, pour les flammes en expansion sphérique et de son lien avec la vitesse de combustion laminaire S_l^0 . Une nouvelle technique de mesure, basée sur un traitement PIV d'images de tomographie laser a été développée et sa validité démontrée pour différents combustibles, caractéristiques d'une grande variété de mélanges (nombre de Lewis différent de l'unité). Les résultats de ce chapitre ont montré que l'estimation de la vitesse de consommation par une équation prenant en compte le changement de densité (Eq. 8.41) pour des mesures effectuées dans des cellules à volume constant est plus précise que l'équation classiquement utilisée et basée sur un bilan de masse des produits de combustion avec l'hypothèse de gaz brûlés inertes à l'équilibre thermodynamique adiabatique (Eq. 3.16). Il a aboutie sur un bilan des définitions de vitesses de flamme, liées à la vitesse de combustion laminaire S_l^0 , qui peuvent être mesurées.

Le deuxième s'est concentré à étudier les incertitudes liées à trois phénomènes impactant sur la détermination de la vitesse de combustion laminaire :

1. l'impact des transferts d'énergie thermique radiatifs,
2. l'impact de la diffusion préférentielle,
3. l'impact de l'introduction de modèles d'extrapolation à étirement nul sur l'exploitation des mesures brutes.

L'étude du premier impact, lié aux effets du rayonnement thermique, a mis en évidence une disparité des valeurs de la LBV S_l^0 mesurée en fonction de la définition de la vitesse expérimentale utilisée sur un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ proposé dans [185]. Les vitesses $\tilde{S}_{d,b}^0$ et $\tilde{S}_{d,u}^0$ sont en effet différentes pour chaque condition thermodynamique et de richesse étudiées, telle que la $\tilde{S}_{d,u}^0$ soit plus proche de résultats issus de simulations 1D. Cette différence, pour une même pression, est maximale à $\phi = 1.1$ et décroît de par et d'autre de cette richesse. A l'inverse, pour chaque richesse, cette différence décroît avec l'augmentation de la pression initiale avant combustion. Ainsi, elle aurait pu être attribuée à une mauvaise estimation de l'état thermodynamique des gaz brûlés par l'hypothèse $\rho_b = \rho_b^{eq}$ dans la définition de $\tilde{S}_{d,b}$. Mais des mesures de profils temporels ponctuels de température par diffusion Rayleigh ont montré que l'état thermodynamique des gaz brûlés pouvait être considéré comme proche de l'état d'équilibre chimique adiabatique dans l'intervalle de temps où la flamme est observée. Dès lors, une fois de plus c'est le modèle d'extrapolation à étirement nul qui a été remis en cause. En effet, même si sur la plage de mesure les effets du rayonnement ne sont pas mesurables, ils agissent à de plus forts rayons et doivent être pris en compte dans l'évolution de la vitesse étudiée en fonction de l'étirement. Or cette évolution est reconstruite par les modèles d'extrapolation. Enfin, l'étude numérique de *Jayachandran et al.* [67] a défini la vitesse $\tilde{S}_{d,u}$ ayant un comportement en fonction de l'étirement identique quel que soit le modèle de rayonnement utilisé, i.e. adiabatique ou non. Cette affirmation s'est confirmée dans notre étude où l'analyse des résultats a permis de montrer expérimentalement que la vitesse estimée $\tilde{S}_{d,u}^0$ était proche de résultats issus de simulation 1D.

La deuxième section a fait l'analyse des effets de la diffusion préférentielle lors de la propagation d'un front de flamme et de son influence sur la détermination de la vitesse de combustion laminaire. Il a été montré dans cette section que les effets de diffusion préférentielle sont clairement identifiables, à partir de mélanges combustibles H_2/air . Les résultats expérimentaux ont mis en évidence une température de fin de combustion supérieure à la température estimée par calcul à l'équilibre chimique adiabatique quelle que soit la condition

initiale de pression pour des mélanges pauvres ($\phi < 0.6$) et inversement pour des mélanges très riches ($\phi > 5.0$). De plus, l'analyse d'une flamme H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ pour des conditions sub-atmosphériques de pression a démontré que cet écart de température, induit par des effets de diffusion préférentielle, augmente avec la diminution de la pression. L'ensemble des résultats est alors en accord avec l'interprétation mécanique de *Yang et al.* [190] et *Varea et al.* [44] qui note une augmentation de la richesse locale au passage du front de flamme que ce soit pour des mélanges initialement pauvres ou très riches. L'étude expérimentale de ce type de flammes nécessite la mise en place de diagnostics spécifiques, donnant accès directement aux grandeurs caractéristiques. En effet, les deux vitesses S_c et $\tilde{S}_{d,u}$ ont montré un bon accord sur l'estimation de la vitesse de combustion laminaire extrapolée linéairement à étirement nul entre elles et par comparaison avec la simulation 1D. Au contraire, la définition de $\tilde{S}_{d,b}$ n'a pas permis d'estimer avec une bonne précision la vitesse de combustion laminaire S_l^0 autrement qu'en introduisant les résultats d'un calcul DNS pour corriger la valeur de la densité dans les gaz brûlés.

Enfin dans la troisième section, il a été montré à partir de résultats numériques et expérimentaux que l'introduction d'incertitudes est inhérente à l'utilisation d'un modèle d'extrapolation de l'étirement et que leur précision est fonction de l'intervalle de rayons de flamme exploité. Il est alors crucial d'exprimer clairement l'incertitude de mesure pour définir précisément celle liée à la vitesse extrapolée à étirement nul. Les récents travaux de *C. Xiouris, F.N. Egolfopoulos et al.* [45] ont notamment été cités pour l'estimation des incertitudes de mesure. De plus, ils ont démontré que l'emploi d'un modèle linéaire ou non-linéaire est fonction du mélange, mais pas nécessairement uniquement sélectionnable en fonction du nombre de Lewis du mélange combustible étudié.

Ainsi, une nouvelle approche d'exploitation des mesures brutes a été proposée. Elle consiste à reproduire l'expérience à l'aide d'une simulation numérique directe et opérer une comparaison directe entre l'expérience et le calcul. Elle permet ainsi de se soustraire des effets des modèles d'extrapolation mais nécessite la mise en place d'outils numériques complexes et coûteux.

Perspectives

Au final, les outils théoriques, expérimentaux et l'ensemble des collaborations et des liens tissés au cours de cette thèse forment un outil complet pour l'étude et la caractérisation des flammes de prémélange. Ils ont permis un élargissement de nos compétences par l'introduction d'un travail d'analyses croisées entre expériences et simulations numériques, présenté comme important et à favoriser pour de futurs travaux.

Comme il a été vu au chapitre 4, le code *YALES2* est capable de réaliser des simulations numériques directes avec diverses modélisations des échanges radiatifs d'énergie thermique en prenant en compte la chimie complexe et la résolution des équations de transport de chaque espèce présente lors de la combustion. Il serait donc intéressant de pouvoir confirmer les observations expérimentales faites sur le mélange $CH_4 / (O_2 - CO_2 - He)$ en réalisant des simulations pour plusieurs conditions et permettre ainsi une analyse plus complète des effets du rayonnement et de la diffusion préférentielle sur la mesure de la vitesse de combustion laminaire. Notamment pour de grandes flammes laminares actuellement représentées par les modèles d'extrapolation de l'étirement. Néanmoins, la mise en place de calculs DNS pour ces mélanges et conditions nécessite à l'heure actuelle des capacités de temps de calcul faramineuses. En premier lieu, il serait donc intéressant d'introduire dans ce code différentes solutions pour réduire ces temps, comme des algorithmes d'adaptation dynamique de maillages adaptatifs ou la réduction du temps de calcul de la chimie par des méthodes HTTC [194, 195, 196].

Au final, ce type de simulations pourraient permettre une étude systématique des dispositifs expérimentaux et permettre une analyse complète et pertinente des mesures.

De plus, les mesures expérimentales ont été réalisés au cours de cette thèse pour des conditions thermodynamiques de pression et température inférieures à la réalité des systèmes de production d'énergies. Il serait donc intéressant de répéter nos études pour des conditions thermodynamiques initiales de température et de pression plus élevées.

Enfin, la mise en place de dispositifs permettant des mesures par LIF ou encore par diffusion Raman de la température pourrait donner des informations quantitatives expérimentales de certains paramètres qui ne sont qu'étudiés numériquement actuellement.

Table des figures

1.1	Evolution de la consommation mondiale en énergie depuis les années 1970. * : La catégorie 'Other' comporte les énergies : géothermie, solaire, éolienne... (source : IEA 2015 [1]).	1
1.2	Evolution de l'émission mondiale de CO_2 depuis les années 1970. * : La catégorie 'Other' comporte l'émission de la combustion des déchets non recyclables et des déchets ménagés (source : IEA 2015 [1]).	2
1.3	Evolution et prédiction des sources et de leur consommation pour la production d'énergie de 1990 à 2040. * : La catégorie 'Other' comporte la valorisation de la combustion des déchets non recyclables et des déchets ménagés (source : IEA 2015).	3
1.4	Evolution de la vitesse de combustion laminaire en fonction de la richesse pour un mélange H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression, extraite de [6].	4
1.5	Evolution du coefficient caractéristique k_1 de la réaction $H + O_2 \rightarrow O + OH$ en fonction de l'inverse de la température, extraite de [8].	5
2.1	Schématisme classique d'une flamme laminaire de prémélange 1D plan.	12
2.2	Schéma de la structure d'une flamme laminaire de prémélange 1D	17
2.3	Définitions des épaisseurs de flamme de prémélange	18
2.4	Schéma d'une flamme infiniment mince	20
3.1	Schéma de différentes configurations expérimentales de flamme laminaire et de leurs états de flamme associés.	31
3.2	Valeur de la LBV mesurée pendant la seconde moitié du XX^e siècle d'une flamme stoechiométrique CH_4/air à pression et température ambiante, extrait de [49].	32

3.3	Schéma d'un élément de surface δA soumis à des effets de courbure et de cisaillement [55].	34
3.4	Schéma de l'impact de la courbure et du cisaillement sur la surface de flamme.	35
3.5	Schéma d'un front de flamme perturbé par des instabilités induites par les forces de gravité.	37
3.6	Schéma d'un front de flamme perturbé par des instabilités hydrodynamiques associées à la déflexion des lignes de courant.	38
3.7	Evolution du nombre de Lewis effectif, comparée au nombre de Lewis des réactifs en Excès et en Déficit, en fonction de la richesse pour une flamme CH_4/air	39
3.8	Schéma des effets des instabilités thermo-diffusives sur un front de flamme laminaire en fonction du nombre de Lewis.	40
3.9	Evolution du produit locale ρu en fonction de la position d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions NTP, dans le cas idéal 1D plan et réel 3D sphérique.	42
3.10	Illustration des effets du rayonnement thermique sur la température (a) et la vitesse du fluide (b) d'une flamme CH_4/air aux conditions NTP et $\phi = 1.4$, extrait de [81].	45
3.11	Illustration des effets du rayonnement sur la vitesse de propagation et de déplacement d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions NTP à partir de trois modèles de rayonnement, extrait de [67]. Les symboles bleus représentent les résultats du modèle adiabatique, les rouges ceux du modèle OTM et les verts un modèle OTM modifié pour se rapprocher d'une flamme réelle.	46
3.12	Evolution de la vitesse de propagation en fonction de l'étirement et son extrapolation linéaire et non-linéaire de flammes CH_4/air à $P = 1$ bar, $T = 300$ K pour les richesses : (a) $\phi = 0.8$ et (b) $\phi = 1.3$; extrait de [88].	51
3.13	Comparaison des modèles d'extrapolation à étirement nul linéaire et non-linéaire en fonction du nombre $\tilde{\sigma}$, extraite de [86].	52
3.14	Evolution de la vitesse de déplacement normalisée en fonction de l'étirement adimensionné pour différentes isothermes $T^* = \frac{T}{T_u}$ (a) et du nombre de Markstein associé à la vitesse de déplacement en fonction la température adimensionnée T^* (b), d'une flamme stoechiométrique de propane/air à $T = 298K$ et $P = P_{atm}$, extrait de [21].	56

3.15	Evolution de la vitesse de déplacement normalisée en fonction de l'étirement adimensionné pour différentes isothermes $T^* = \frac{T}{T_u}$, d'une flamme stoechiométrique de propane/air $T = 298K$ et $P = P_{atm}$, extrait de [21].	57
3.16	Profils de température mesurés en configuration de flamme à jets opposés pour différentes valeurs d'étirement sur des flammes : CH_4/air ($Le \approx 1$), C_3H_8/air ($Le > 1$) et H_2/air ($Le < 1$), dans les conditions NTP, extraite de [98].	58
3.17	Evolution de l'épaisseur de flamme en fonction du rayon de flamme pour différentes configurations d'une flamme CH_4/air aux conditions NTP, extraite de [99].	59
3.18	Effet de l'énergie déposée à l'allumage sur la vitesse de propagation d'une flamme SEF aux conditions NTP, extrait de [7].	61
3.19	Evolution de la vitesse absolue normalisée et de la vitesse de déplacement à l'isotherme des gaz brûlés d'une flamme CH_4/air , extrait de [110]. Dans cette figure $\tilde{S}_{d,b}$ est représentée par la variable S_u	62
3.20	Effet de la cellularité du front de flamme sur la vitesse de propagation absolue.	63
3.21	Evolution temporelle du rayon de flamme (a) et de la vitesse absolue en fonction de l'étirement (b) pour une flamme $n - C_4H_{10}/air$ aux conditions NTP, extrait de [87].	64
4.1	Evolution du terme source du radical OH dans l'épaisseur du front sur un maillage à $10 \mu m$, d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression simulée avec YALES2.	74
4.2	Schéma illustrant la définition de la Luminance.	76
4.3	Schéma du domaine de calcul 3D, équivalent à une sphère, exploité avec le code YALES2.	85
4.4	Représentation des profils de fraction massique des espèces majoritaires en fonction de la variable Y_c en fonction de la taille de maille.	86
4.5	Représentation des profils de fraction massique des espèces radicalaires en fonction de la variable Y_c en fonction de la taille de maille.	87
4.6	Evolution des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et $\tilde{S}_{d,u}$ en fonction de l'étirement en fonction de la taille de maille.	87
4.7	Schéma du processus d'évaporation d'une goutte huile à travers un front de flamme.	89
5.1	Schéma de la cellule de mesure.	94

5.2	Schéma de la réponse d'un capteur piezo-électrique en fonction de la fréquence d'acquisition.	96
5.3	Dispositif expérimental dédié à la technique d'ombroscopie au laboratoire PRISME.	99
5.4	Visualisation de la propagation d'une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions thermodynamiques initiales $P = 1 atm$ et $T = 298 K$, enregistrée par la technique d'ombroscopie.	100
5.5	Animation de la propagation d'une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions thermodynamiques initiales $P = 1 atm$ et $T = 298 K$ enregistrée par ombroscopie. <i>En version pdf, appuyez sur ▷ pour lancer l'animation.</i>	101
5.6	Schéma de détection du rayon de flamme par la technique ombroscopie.	102
5.7	Schéma de principe du volume de mesure ponctuel des signaux de diffusion Rayleigh.	105
5.8	Dispositif pour la mesure de profils de rayonnement par diffusion Rayleigh.	108
5.9	Vue du passage optique réduit pour l'introduction du laser.	109
5.10	Superposition de plusieurs signaux Rayleigh normalisés pour différents réglages du dispositif de mesure en fonction du temps sur une flamme CH_4/air à la richesse $\phi = 0.8$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression.	110
5.11	Schéma de fonctionnement du traitement des signaux Rayleigh pour les mélanges H_2/air	113
5.12	Illustration du signal Rayleigh normalisé, mesuré pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	114
6.1	Vue de la cellule de mesure présente au laboratoire CORIA.	118
6.2	Dispositif expérimental au laboratoire CORIA.	119
6.3	Vue d'ensemble du dispositif optique pour générer une nappe laser.	122
6.4	Visualisation de la propagation d'une flamme stoechiométrique CH_4/air à $P = 1 atm$ et $T = 298 K$, enregistrée par la technique de tomographie laser.	123
6.5	Animation de la propagation d'une flamme stoechiométrique CH_4/air à $P = 1 atm$ et $T = 298 K$, enregistrée par la technique de tomographie laser. <i>En version pdf, appuyez sur ▷ pour lancer l'animation.</i>	124
6.6	Schéma du profil de vitesse de gaz frais devant le front de flamme et dans la zone de préchauffage, extrait de [69].	125

6.7	Superposition du spectre d'absorption de l'huile de silicone <i>Rhodorsil</i> 550 et d'un spectre d'émission simulé des gaz brûlés d'une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à la richesse $\phi = 0.8$, $P = 0.1MPa$ et $T = 298K$	127
6.8	Vitesse de propagation d'une flamme $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ en fonction de la richesse avec et sans présence d'ensemencement pour deux pressions initiales distinctes.	128
6.9	Schéma de détection du rayon de flamme par la technique de tomographie laser.	129
6.10	Evaluation de l'isotherme d'évaporation des gouttes de <i>Rhodorsil</i> 550 et de sa position dans le front de flamme en fonction de leur diamètre initial. La position $x = 0$ représente l'iso-surface d'entrée dans le front de flamme.	130
6.11	Illustration de la résolution spatiale du profil de vitesse des gaz frais mesuré expérimentalement et comparé à un profil numérique issu d'une simulation 3D effectuée par <i>YALES2</i> (Y2) reproduisant à l'identique l'expérience.	132
6.12	Animation présentant l'extraction du profil de vitesse des gaz frais devant le front de flamme à partir des images de tomographie laser, extraite de [165]. <i>En version pdf, appuyez sur ▷ pour lancer l'animation.</i>	133
7.1	Superposition des vitesses de combustion laminaire en fonction de la richesse, mesurées en 2013 sur un mélange CH_4/air aux conditions atmosphériques par les différentes équipes composant la collaboration CPII.	136
7.2	Visualisation des images enregistrées par les dispositifs expérimentaux de différents laboratoires.	138
7.3	Vue du dispositif de chromatographie en phase gazeuse.	140
7.4	Evolution en fonction de la richesse des vitesses $\tilde{S}_{d,u}^0$ et $\tilde{S}_{d,b}^0$ pour un mélange C_2H_6/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	141
7.5	Illustration pour le dispositif du laboratoire CORIA de la répétabilité de la mesure de la vitesse de propagation absolue S_f en superposant pour différents mélanges combustibles et richesses aux conditions thermodynamiques atmosphériques quatre essais.	142
7.6	Illustration pour le dispositif du laboratoire CORIA de la répétabilité de la mesure de la vitesse d'entrée des gaz frais dans le front de flamme u_g en superposant pour différents mélanges combustibles et richesses aux conditions thermodynamiques atmosphériques quatre essais.	143

7.7	Illustration de la répétabilité de la mesure de la vitesse de propagation absolue S_f en superposant pour différentes richesses d'un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ aux conditions thermodynamiques atmosphériques ($P = 1 \text{ atm}$ et $T = 298 \text{ K}$) quatre différents tirs avec et sans présence d'ensemencement dans les gaz frais sur le dispositif du laboratoire PRISME.	144
7.8	Représentation de la vitesse de propagation absolue S_f en fonction du rayon de flamme R_f mesurée pour trois richesses sur quatre dispositifs expérimentaux différents aux conditions thermodynamiques atmosphériques.	146
7.9	Représentation de la vitesse de propagation absolue S_f en fonction de l'éirement du front de flamme κ mesurée pour trois richesses sur quatre dispositifs expérimentaux différents aux conditions thermodynamiques atmosphériques.	147
8.1	Evolution de la vitesse de propagation absolue de plusieurs isothermes contenues dans le front de flamme en fonction de leur position pour deux mélanges carburant/air aux conditions atmosphériques de température et de pression	164
8.2	Evolution de la vitesse de consommation calculée à partir de plusieurs espèces en fonction de l'éirement pour deux mélanges carburant/air à différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression	165
8.3	Evolution de l'isotherme associée aux deux rayons équivalents $R_{eq,k}$, Eq. 8.18 (traits pleins) et $R_{eq2,k}$, Eq. 8.38 (traits pointillés) déterminés pour différentes espèces k ciblées d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques.	166
8.4	Vitesse de propagation absolue des deux rayons équivalents déterminés pour différentes espèces k ciblées d'une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques.	167
8.5	Représentation de la sensibilité de la vitesse de combustion à la définition d'un seul rayon équivalent, assimilé à la position d'une isotherme T , sur une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	168
8.6	Evolution de l'isotherme caractéristique des rayons numériques $R_{eq,DRS}$ et $R_{eq2,DRS}$ et expérimental R_{tomo} en fonction de la position du front de flamme pour trois différentes flammes dans les conditions atmosphériques de température et de pression.	170

8.7	Différence normalisée entre l'isotherme d'évaporation des traceurs de la tomographie laser et les deux rayons équivalents $R_{eq,DRS}$ et $R_{eq2,DRS}$ définis dans les équations de la vitesse de consommation : Eq. 8.22 et Eq. 8.40 pour différentes flammes dans les conditions atmosphériques de température et de pression.	171
8.8	Schéma des variables et vecteurs définis pour déterminer la densité des gaz frais ρ_u à partir d'un volume de contrôle.	174
8.9	Validation des équations de détermination de ρ_u (Eq. 8.51) à partir de simulations YALES2 3D.	175
8.10	Schéma du mode de calcul pour déterminer le terme de compression dans les gaz frais $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$	177
8.11	Influence de la distance au front de flamme d sur la détermination du terme $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	177
8.12	Répétabilité des mesures et comparaison exp/num du terme $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	178
8.13	Comparaison des termes $\frac{1}{\rho_u} \frac{d\rho_u}{dt}$ et $\frac{1}{\gamma_u P} \frac{dP}{dt}$ en fonction du rayon de flamme, pour une flamme stoechiométrique CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	180
8.14	Comparaison entre les résultats numériques (symboles pleins) et expérimentaux (symboles creux) de la vitesse de consommation de flammes CH_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	182
8.15	Superposition des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c avec leurs extrapolations linéaires respectives pour différents mélanges initiés à la pression atmosphérique.	184
8.16	Superposition des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c avec leurs extrapolations linéaires respectives pour plusieurs richesses d'un mélange C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$	186
8.17	Evolution en fonction de la richesse de la longueur de Markstein d'une flamme C_8H_{18}/air à $T = 373 K$ et $P = 1 atm$	187
8.18	Schéma des équations reliées à la vitesse de combustion laminaire non étirée S_l^0 et définissant une longueur de Markstein propre à chacune.	192
9.1	Evolution en fonction de la richesse du nombre de Lewis effectif à pression atmosphérique pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$	195

9.2	Comparaison des vitesses de flamme à étirement nul $S_{d,u}^0$ et $S_{d,b}^0$ en fonction de la richesse aux conditions atmosphériques de pression et de température. Les données numériques de <i>Z. Chen</i> [185] sont superposées sur la figure (b).	197
9.3	Rapport relatif des vitesses de flamme à étirement nul en fonction de la richesse pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à pression atmosphérique.	198
9.4	Evolution en fonction de la richesse des longueurs de Markstein $\ell_{d,u}$ et $\ell_{d,b}$ de flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ aux conditions atmosphériques de température et de pression.	199
9.5	Evolution de la longueur de Markstein associée à la vitesse de propagation du front de flamme $S_{d,b}$ d'un mélange CH_4/air , extrait de [70].	200
9.6	Evolution des vitesses de flamme à étirement nul $S_{d,u}^0$ et $S_{d,b}^0$ pour différentes richesses en fonction de la pression du mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à température ambiante.	200
9.7	Loi d'évolution avec la pression (Eq. 9.2) des vitesses à étirement nul $S_{d,u}$ et $S_{d,b}$ en fonction de la richesse pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$	201
9.8	Rapport relatif des vitesses de flamme à étirement nul (RFSR Eq. 9.1) en fonction de la pression pour le mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$	202
9.9	Profils de température mesurés en un point par diffusion Rayleigh sur des flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ pour trois différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression.	204
9.10	Profils de température mesurés en un point par diffusion Rayleigh sur des flammes $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ pour trois différentes richesses à la température ambiante et une pression $P = 3 \text{ bar}$	204
9.11	Superposition des profils de diffusion Rayleigh mesurés sur des flammes CH_4/air et $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ pour trois différentes richesses aux conditions atmosphériques de température et de pression.	206
9.12	Vitesse de consommation d'un mélange $CH_4/O_2 - CO_2 - He$ à richesse $\phi = 1.0$ aux conditions atmosphériques de température et de pression.	209
9.13	Evolution en fonction de la richesse des nombre de Lewis caractéristiques (tous définis à la section 3.3.3) de mélanges H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	213

9.14	Evolution du profil temporel de température pour deux mélanges H_2/air aux conditions atmosphériques de température et de pression. La courbe bleue représente la température initiale du mélange et la rouge la température de fin de combustion à l'équilibre chimique adiabatique pour un mélange conservant la richesse initiale.	214
9.15	Evolution en fonction de la richesse locale ϕ_{loc} de la température de fin de combustion adiabatique.	215
9.16	Evolution des profils temporels de diffusion Rayleigh expérimentaux et synthétiques d'une flamme H_2/air à richesse $\phi = 0.5$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression.	217
9.17	Superposition des différentes définitions de la vitesse de combustion laminaire et de leurs extrapolations linéaires respectives pour une flamme expérimentale H_2/air à la richesse $\phi = 0.5$ et aux conditions atmosphériques de température et de pression.	218
9.18	Différence normalisée entre la température de fin de combustion moyennée T_b et la température de fin de combustion d'un calcul adiabatique à l'équilibre thermodynamique d'un mélange H_2/air en fonction de pressions sub-atmosphériques.	220
9.19	Evolution en fonction de la richesse des nombres de Lewis effectifs, du réactif en déficit et du réactif en excès (tous définis à la section 3.3.3), à pression atmosphérique des deux mélanges $n - C_7H_{16}/air$ et $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$, respectivement à $T = 373 K$ et $T = 298 K$	224
9.20	Superposition de résultats numériques et expérimentaux des vitesses caractéristiques S_f et u_g de flammes C_2H_4/air aux conditions atmosphériques de température et de pression.	225
9.21	Superposition de résultats numériques et expérimentaux des vitesses caractéristiques S_f et u_g de flammes $n - C_7H_{16}/air$ à pression atmosphérique et $T = 373 K$	225
9.22	Différence moyenne et écart-type entre les résultats numériques et expérimentaux sur les vitesses de flamme S_f , u_g et leur différence $\tilde{S}_{d,u}$ pour les deux mélanges étudiés. Représentation : \square : S_f , \circ : u_g et \triangle : $\tilde{S}_{d,u}$	226

- 9.23 Différence entre la valeur calculée avec *Premix* de S_l^0 et la valeur extrapolée à étirement nul des résultats numériques pour deux intervalles de rayons du mélange $C_2H_4/(0.167 O_2 + 0.833 N_2)$ en fonction de la richesse. Représentation : **X** : extrapolation linéaire de S_f , \diamond : extrapolation non-linéaire de S_f et \square : extrapolation non-linéaire de $\tilde{S}_{d,u}$ 227
- 9.24 Différence entre la valeur calculée avec *Premix* de S_l^0 et la valeur extrapolée à étirement nul des résultats numériques pour deux intervalles de rayons du mélange $n - C_7H_{16}/air$ en fonction de la richesse. Représentation : **X** : extrapolation linéaire de S_f , \diamond : extrapolation non-linéaire de S_f et \square : extrapolation non-linéaire de $\tilde{S}_{d,u}$ 228
- 9.25 Différence entre la valeur calculée avec *Premix* de S_l^0 et la valeur extrapolée à partir des mesures expérimentales des deux mélanges étudiés en fonction de leur richesse. Représentation : \circ : extrapolation linéaire de S_f , \diamond : extrapolation non-linéaire de S_f et \triangle : extrapolation non-linéaire de $\tilde{S}_{d,u}$ 229

Liste des tableaux

3.1	Signe du nombre de Markstein en fonction du nombre de Lewis, évalué par la théorie asymptotique hydrodynamique.	55
4.1	Synthèse des caractéristiques des codes numériques exploités	91
5.1	Réfractivité molaire, indice de réfraction et section efficace de diffusion Rayleigh de différents gaz dans les conditions thermodynamiques : $P = 1 \text{ atm}$ et $T = 295 \text{ K}$ et pour une longueur d'onde incidente de $\lambda = 532 \text{ nm}$	106
6.1	Propriétés de l'huile de silicone <i>Rhodorsil</i> 550, implémentées dans le code YALES2 pour des simulations 1D d'évaporation de goutte au passage d'un front de flamme. 126	
7.1	Caractéristiques principales des dispositifs expérimentaux de plusieurs laboratoires européens, composant la collaboration CPII.	138
7.2	Résultats de la chromatographie en phase gazeuse.	140
8.1	Nombre de Lewis et Longueur de Markstein associés aux mélanges présentés dans la figure 8.15.	185
8.2	Résultats pour plusieurs richesses de l'extrapolation à étirement nul des vitesses $\tilde{S}_{d,b}$ et S_c et leurs longueurs de Markstein respectives pour un mélange C_8H_{18}/air à $T = 373 \text{ K}$ et $P = 1 \text{ atm}$	185
8.3	Tableau récapitulatif des différentes expressions de la vitesse de consommation pour la configuration de flamme en expansion sphérique et de leur accessibilité : numérique (Num) et expérimentale (Exp).	188
9.1	Température à l'équilibre chimique adiabatique pour différentes richesses des deux mélanges CH_4/air et $CH_4/O_2 - CO_2 - He$	205

Bibliographie

- [1] IEA International Energy Agency. Key world energy statistics. Technical report, 2015.
pages 1, 2 et 239
- [2] IFPEN Institut français du pétrole et énergies nouvelles.
<http://www.ifpenergiesnouvelles.fr>. *page 2*
- [3] C.H. Sohn, Z. Chen, and Y. Ju. Effects of radiation on the uncertainty of flame speed determination using spherically propagating flames with co/co₂/h₂o dilutions at elevated pressures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 86 :820–825, 2015.
pages 3, 44 et 45
- [4] M. Kuznetsov, J. Grune, S. Kobelt, K. Sempert, and T. Jordan. Experiments for the hydrogen combustion aspects of ITER LOVA scenarios. *Fusion Engineering and Design*, 86(9) :2747–2752, 2011.
pages 3 et 219
- [5] F. N. Egolfopoulos, N. Hansen, Y. Ju, K. Kohse-Hoinghaus, C. K. Law, and F. Qi. Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry. *Progress in Energy and Combustion Science*, (0). *pages 4, 30 et 44*
- [6] C.K. Law, F. Wu, F.N. Egolfopoulos, Vyaas Gururajan, and Hai Wang. On the rational interpretation of data on laminar flame speeds and ignition delay times. *Combustion Science and Technology*, 187(1-2) :27–36, 2015.
pages 4 et 239
- [7] Z. Chen. On the accuracy of laminar flame speeds measured from outwardly propagating spherical flames : Methane/air at normal temperature and pressure. *Combustion and Flame*, 162(6) :2442–2453, 2015. *pages 5, 24, 30, 44, 60, 61, 62, 136, 137, 150 et 241*
- [8] Z. Hong, D.F. Davidson, and R.K. Hanson. An improved h₂/o₂ mechanism based on recent shock tube/laser absorption measurements. *Combustion and Flame*, 158(4) :633–644, 2011.
pages 5 et 239

- [9] CORIA UMR6614. Lbv, on the importance of the accurate measurement of laminar burning velocity, and its implication for kinetics validation and turbulent combustion simulations, 2015. *pages 5 et 135*
- [10] G.E. Andrews and D. Bradley. Determination of burning velocities : A critical review. *Combustion and Flame*, 18 :133–153, 1972. *pages 13, 29, 31 et 32*
- [11] T. Poinsoot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2001. *pages 13, 14, 19, 20, 37, 46, 73, 84 et 159*
- [12] R. Kee, F. Rupley, J. Miller, M. Coltrin, J. Grcar, E. Meeks, H. Moffat, A. Lutz, G. Dixon-Lewis, M. Smooke, J. Warnatz, G. Evans, R. Larson, R. Mitchell, L. Petzold, W. Reynolds, M. Caracotsios, W. Stewart, P. Glarborg, C. Wang, and O. Adigun. Chemkin collection, release 3.6. Technical report, 2000. *pages 15, 80 et 227*
- [13] D.G. Goodwin, H.K. Moffat, and R.L. Speth. Cantera : An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. <http://www.cantera.org>, 2016. Version 2.2.1. *page 15*
- [14] E. Mallard and H. Le Chatelier. Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les melanges explosifs. *Comptes rendus de l'Academie des Sciences, Paris*, 93 :145, 1881. *page 16*
- [15] J. Abraham, F. Williams, and F. Bracco. A discussion of turbulent flame structure in premixed charges. *SAE Technical Paper 850345*, 1985. *page 18*
- [16] Y.B. Zeldovich. *Theory of combustion and detonation of gases*. Academy of Sciences (in Russian), 1944. *page 18*
- [17] F.A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985. *pages 19 et 72*
- [18] D. B. Spalding. *Some fundamentals of combustion*. Gas Turbine series. Butterworths Scientific, London, 1955. *page 19*
- [19] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner Jr., V.V. Lissianski, and Z. Qin. Gri-mech homepage, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/. Gas Research Institute. *pages 22, 84, 88 et 136*
- [20] J.B. Chen and H.G. Im. Stretch effects on the burning velocity of turbulent premixed hydrogen/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1) :211–218, 2000. *page 22*

- [21] G. K. Giannakopoulos, A. Gatzoulis, C. E. Frouzakis, M. Matalon, and A. G. Tomboulides. Consistent definitions of flame displacement speed and markstein length for premixed flame propagation. *Combustion and Flame*, 162(4) :1249–1264, 2015. *pages 22, 23, 30, 40, 43, 50, 53, 54, 55, 56, 57, 189, 240 et 241*
- [22] G. Dayma, F. Halter, and P. Dagaut. New insights into the peculiar behavior of laminar burning velocities of hydrogen-air flames according to pressure and equivalence ratio. *Combustion and Flame*, 161(9) :2235–2241, 2014. *pages 24, 82 et 220*
- [23] B. Lewis and G. von Elbe. *Combustion, Flames and Explosions of Gases*. Academic Press, 3rd edn. edition, 1987. *page 29*
- [24] O. Kurata, S. Takahashi, and Y. Uchiyama. Influence of preheat temperature on the laminar burning velocity of methane-air mixtures. *SAE Technical Paper*, 1994. *page 29*
- [25] Y. Ogami and H. Kobayashi. Laminar burning velocity of stoichiometric ch₄/air premixed flames at high-pressure and high-temperature. *JSME international journal. Ser. B, Fluids and thermal engineering*, 48 :603–609, 2006. *page 29*
- [26] Y. Dong, C.M. Vagelopoulos, G.R. Spedding, and F.N. Egolfopoulos. Measurement of laminar flame speeds through digital particle image velocimetry : Mixtures of methane and ethane with hydrogen, oxygen, nitrogen, and helium. *Proceedings of the Combustion Institute*, pages 1419–1426, 2002. *page 29*
- [27] Y. Huang, C.J. Sung, and J.A. Eng. Laminar flame speeds of primary reference fuels and reformer gas mixtures. *Combustion and Flame*, 139 :239–251, 2004. *page 29*
- [28] C.M. Vagelopoulos and F.N. Egolfopoulos. Direct experimental determination of laminar flame speeds. *Proceedings of the Combustion Institute*, 27 :513–519, 1998. *page 29*
- [29] C.M. Vagelopoulos, F.N. Egolfopoulos, and C.K. Law. Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin-flame technique. *Proceedings of the Combustion Institute*, 25 :1341–1347, 1994. *page 29*
- [30] F.N. Egolfopoulos, P. Cho, and C.K. Law. Laminar flame speeds of methane-air mixtures under reduced and elevated pressures. *Combustion and Flame*, 76 :375–391, 1989. *page 29*
- [31] C. K. Law. *A Compilation of Experimental Data on Laminar Burning Velocities*, volume 15 of *Lecture Notes in Physics Monographs*, chapter 2, pages 15–26. Springer Berlin Heidelberg, 1993. *page 29*

- [32] A. Van Maaren and L. P. H. De Goey. Stretch and the adiabatic burning velocity of methane- and propane-air flames. *Combustion Science and Technology*, 102(1-6) :309–314, 1994. page 29
- [33] L.P.H. de Goey, A. Van Maaren, and R.M. Quax. Stabilization of adiabatic premixed laminar flames on a flat flame burner. *Combustion Science and Technology*, 92 :201–207, 1993. page 29
- [34] K. J. Booschart. *Analysis of the heat flux method for measuring burning velocity*. PhD thesis, 2002. page 29
- [35] J.P.J. Lipzig, E.J.K. Nilsson, L.P.H. De Goey, and A.A. Konnov. Laminar burning velocities of n-heptane, iso-octane, ethanol and their binary and tertiary mixtures. *Fuel*, 2011. page 29
- [36] M. Goswami, R. J. M. Bastiaans, A. A. Konnov, and L. P. H. de Goey. Laminar burning velocity of lean h₂-co mixtures at elevated pressure using the heat flux method. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(3) :1485–1498, 2014. page 29
- [37] D. Bradley, P.H. Gaskell, and X.J. Gu. Burning velocities, markstein lengths, and flame quenching for spherical methane-air flames : a computational study. *Combustion and Flame*, 104 :176–198, 1996. pages 30, 36, 41, 55, 60, 163 et 172
- [38] X.J. Gu, M.Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combustion and Flame*, 121 :41–58, 2000. page 30
- [39] F. Halter, C. Chauveau, N. Djebaili-Chaumeix, and I. Gokalp. Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane-hydrogen-air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, pages 201–208, 2005. page 30
- [40] T. Tahtouh, F. Halter, and C. Mounaim-Rousselle. Measurement of laminar burning speeds and markstein lengths using a novel methodology. *Combustion and Flame*, 156 :1735–1743, 2009. page 30
- [41] Z. Chen, M. P. Burke, and Y. Ju. On the critical flame radius and minimum ignition energy for spherical flame initiation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1) :1219–1226, 2011. pages 30 et 82

- [42] E. Varea, V. Modica, B. Renou, and A.M. Boukhalfa. Pressure effects on laminar burning velocities and markstein lengths for isoctane-ethanol-air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1) :735–744, 2013. *pages 30, 43 et 201*
- [43] P. Brequigny, G. Dayma, F. Halter, C. Mounaim-Rousselle, T. Dubois, and P. Dagaut. Laminar burning velocities of premixed nitromethane/air flames : An experimental and kinetic modeling study. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1) :703–710, 2015. *page 30*
- [44] E. Varea, J. Beeckmann, H. Pitsch, Z. Chen, and B. Renou. Determination of burning velocities from spherically expanding h₂/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1) :711–719, 2015. *pages 30, 63, 112, 183, 211, 213, 214, 217, 218, 220, 229 et 236*
- [45] C. Xiouris, T. Ye, J. Jayachandran, and F.N. Egolfopoulos. Laminar flame speeds under engine-relevant conditions : Uncertainty quantification and minimization in spherically expanding flame experiments. *Combustion and Flame*. *pages 31, 180, 196, 226, 230 et 236*
- [46] F. W. Stevens. The rate of flame propagation in gaseous explosive reactions1. *Journal of the American Chemical Society*, 48(7) :1896–1906, 1926. *page 32*
- [47] F. W. Stevens. The gaseous explosive reaction at constant pressure. the effect of inert gases1. *Journal of the American Chemical Society*, 50(12) :3244–3258, 1928. *page 32*
- [48] B. Lewis and G. von Elbe. On the theory of flame propagation. *The Journal of Chemical Physics*, 2(8) :537–546, 1934. *page 32*
- [49] C.K. Law. Combustion at a crossroads : Status and prospects. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1–29, 2007. *pages 32 et 239*
- [50] C.K. Wu and C.K. Law. On the determination of laminar flame speeds from stretched flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 20 :1941–1949, 1985. *page 33*
- [51] B. Karlovitz, D. W. Denniston, D. H. Knapschaefer, and F. E. Wells. Fourth symposium (international) on combustion studies on turbulent flames. *Symposium (International) on Combustion*, 4(1) :613–620, 1953. *page 33*
- [52] G. H. Markstein. Experimental and theoretical studies of flame-front stability. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 18(3) :199–209, 1951. *pages 33 et 49*
- [53] G.H. Markstein. *Non-steady Flame Propagation*. Pergamon Press, 1964. *page 33*
- [54] F.A. Williams. A review of some theoretical combustions of turbulent flame structure. In *AGARD Conference Proceedings*, volume 164, 1975. *page 33*

- [55] C. K. Law. Dynamics of stretched flames. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1) :1381–1402, 1989. *pages 34 et 240*
- [56] M. Matalon. On flame stretch. *Combustion Science and Technology*, 31(3-4) :169–181, 1983. *page 34*
- [57] S. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame area. *Combustion Science and Technology*, 70(1-3) :1–15, 1990. *page 35*
- [58] P. D. Ronney and H. Y. Wachman. Effect of gravity on laminar premixed gas combustion i : Flammability limits and burning velocities. *Combustion and Flame*, 62(2) :107–119, 1985. *pages 37 et 137*
- [59] G. Darrieus. Propagation d’un front de flamme. *La Technique Moderne (Unpublished) en 1938, Congrès de Mécanique Appliquée en 1945*. *page 37*
- [60] L. D. Landau. On the theory of slow combustion. *Acta Physicochimica URSS*, 19 :77–85, 1944. *page 37*
- [61] A. G. Istratov and V. B. Librovitch. On the stability of gasdynamic discontinuities associated with chemical reactions. the case of spherical flame. *Acta Astronautica*, 14 :453 – 467, 1969. *page 38*
- [62] J. K. Bechtold and M. Matalon. Hydrodynamic and diffusion effects on the stability of spherically expanding flames. *Combustion and Flame*, 67(1) :77–90, 1987. *page 38*
- [63] J.K. Bechtold and M. Matalon. The dependence of the markstein length on stoichiometry. *Combustion and Flame*, 127 :1906–1913, 2001. *pages 38, 53 et 155*
- [64] P. Clavin. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11 :1–59, 1985. *pages 39 et 50*
- [65] Morley C. Gaseq, <http://www.gaseq.co.uk/>, V 0.79 Janv 2005. *page 42*
- [66] Z. Chen. Effects of radiation and compression on propagating spherical flames of methane/air mixtures near the lean flammability limit. *Combustion and Flame*, 157 :2267–2276, 2010. *pages 43, 44 et 61*
- [67] J. Jayachandran, R. Zhao, and F. N. Egolfopoulos. Determination of laminar flame speeds using stagnation and spherically expanding flames : Molecular transport and radiation effects. *Combustion and Flame*, 161(9) :2305–2316, 2014. *pages 43, 44, 45, 46, 82, 136, 196, 206, 208, 222, 226, 228, 235 et 240*

- [68] J. Santner, F. M. Haas, Y. Ju, and F. L. Dryer. Uncertainties in interpretation of high pressure spherical flame propagation rates due to thermal radiation. *Combustion and Flame*, 161(1) :147–153, 2014. *pages 43, 44 et 45*
- [69] S. Balusamy, A. Cessou, and B. Lecordier. Direct measurement of local instantaneous laminar burning velocity by a new piv algorithm. *Experiments in Fluids*, 50 :1–13, 2010. *pages 43, 125 et 242*
- [70] E. Varea, V. Modica, A. Vandiel, and B. Renou. Measurement of laminar burning velocity and markstein length relative to fresh gases using a new postprocessing procedure : Application to laminar spherical flames for methane, ethanol and isooctane/air mixtures. *Combustion and Flame*, 159 :577–590, 2012. *pages 43, 122, 131, 198, 200 et 246*
- [71] R. D. Reitz. Directions in internal combustion engine research. *Combustion and Flame*, 160(1) :1–8, 2013. *page 43*
- [72] M.I P. Burke, M. Chaos, Y. Ju, F. L. Dryer, and S. J. Klippenstein. Comprehensive h₂/o₂ kinetic model for high-pressure combustion. *International Journal of Chemical Kinetics*, 44(7) :444–474, 2012. *page 44*
- [73] A. Keromnes, W. K. Metcalfe, K. A. Heufer, N.a Donohoe, A. K. Das, C. Sung, J. Herzler, C. Naumann, P. Griebel, O. Mathieu, M.I C. Krejci, E. L. Petersen, W. J. Pitz, and H. J. Curran. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures. *Combustion and Flame*, 160(6) :995–1011, 2013. *pages 44, 82 et 216*
- [74] Y. Ju, G. Masuya, and P.D. Ronney. Effects of radiative emission and absorption on the propagation and extinction of premixed gas flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 27 :2619–2626, 1998. *page 44*
- [75] Y. Ju, H. Guo, F. Liu, and K. Maruta. Effects of the lewis number and radiative heat loss on the bifurcation and extinction of ch₄/o₂-n₂-he flames. *Journal of Fluid Mechanics*, 379 :165–190, 1999. *page 44*
- [76] J. Beeckmann, N. Chaumeix, P. Dagaut, G. Dayma, F. N. Egolfopoulos, F. Foucher, P. de Goey, F. Halter, A. Konnov, C. Mounaim-Rouselle, H. Pitsch, B. Renou, E. Varea, and E. Volkov. Collaborative study for accurate measurements of laminar burning velocity. *Proceedings of the European Combustion Meeting, Lund, Sweden*, 2013. *pages 44, 135 et 145*

- [77] G. Joulin and B. Deshaies. On radiation-affected flame propagation in gaseous mixtures seeded with inert particles. *Combustion Science and Technology*, 47 :299, 1986. page 44
- [78] H. Guo, Y. Jub, K. Maruta, T. Niioka, and F. Liu. Numerical investigation of $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{air}$ and $\text{CH}_4/\text{CO}_2/\text{O}_2$ counterflow premixed flames with radiation reabsorption. *Combustion Science and Technology*, 135(1-6) :49–64, 1998. page 44
- [79] A. Soufiani and J. Taine. High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H_2O , CO_2 and CO , and correlated-k model for H_2O and CO_2 . *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 40(4) :987–991, 1997. pages 44 et 78
- [80] Z. Chen, X. Qin, Y. Ju, Z. Zhao, M. Chaos, and F.L. Dryer. High temperature ignition and combustion enhancement by dimethyl ether addition to methane-air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1215–1222, 2007. pages 44 et 78
- [81] H. Yu, W. Han, J. Santner, X. Gou, C. H. Sohn, Y. Ju, and Z. Chen. Radiation-induced uncertainty in laminar flame speed measured from propagating spherical flames. *Combustion and Flame*, 161(11) :2815–2824, 2014. pages 45 et 240
- [82] A. Bonhomme, L. Selle, and T. Poinso. Curvature and confinement effects for flame speed measurements in laminar spherical and cylindrical flames. *Combustion and Flame*, 160(7) :1208–1214, 2013. pages 47, 61, 156, 172 et 179
- [83] P. Clavin and F.A. Williams. Effects of molecular diffusion and of thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scale and low intensity. *Journal of Fluid Mechanics*, 116 :251–282, 1982. pages 50 et 211
- [84] P. Clavin and G. Joulin. Premixed flames in large scale and high intensity turbulent flow. *Journal de Physique Lettres*, 44 :1–12, 1983. page 50
- [85] M. Matkowsky and Matalon B. J. Flames as gas dynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, 124 :239–259, 1982. pages 50, 52, 54 et 211
- [86] A.P. Kelley and C.K. Law. Nonlinear effects in the experimental determination of laminar flame properties from stretched flames. In *Eastern State Fall Technical Meeting, Chemical & Physical Processes in Combustion*, University of Virginia (US), 2007. pages 50, 51, 52, 222 et 240
- [87] A.P. Kelley and C.K. Law. Nonlinear effects in the extraction of laminar flame speeds from expanding spherical flames. *Combustion and Flame*, 156 :1844–1851, 2009. pages 50, 51, 63, 64, 222 et 241

- [88] F. Halter, T. Tahtouh, and C. Mounaim-Rousselle. Nonlinear effects of stretch on the flame front propagation. *Combustion and Flame*, 157 :1825–1832, 2010. *pages 50, 51, 222 et 240*
- [89] Z. Chen. On the extraction of laminar flame speed and markstein length from outwardly propagating spherical flames. *Combustion and Flame*, 158 :291–300, 2011. *pages 50, 51, 52, 82 et 222*
- [90] P. D. Ronney and G. I. Sivashinsky. A theoretical study of propagation and extinction of nonsteady spherical flame fronts. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 49(4) :1029–1046, 1989. *pages 51 et 222*
- [91] J. K. Bechtold, C. Cui, and M. Matalon. The role of radiative losses in self-extinguishing and self-wrinkling flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :177–184, 2005. *page 51*
- [92] M. Matalon, C. Cui, and J. K. Bechtold. Hydrodynamic theory of premixed flames : effects of stoichiometry, variable transport coefficients and arbitrary reaction orders. *Journal of Fluid Mechanics*, 487 :179–210, 2003. *page 52*
- [93] G. Searby and J. Quinard. Direct and indirect measurements of markstein numbers of premixed flames. *Combustion and Flame*, 82(3) :298–311, 1990. *page 53*
- [94] B. Deshaies and P. Cambray. The velocity of a premixed flame as a function of the flame stretch : an experimental study. *Combustion and Flame*, 82 :361–375, 1990. *page 53*
- [95] C.K. Law and C.J. Sung. Structure, aerodynamics, and geometry of premixed flamelets. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :459–505, 2000. *page 53*
- [96] S.G. Davis, J. Quinard, and G. Searby. Determination of markstein numbers in counterflow premixed flames. *Combustion and Flame*, 130 :112–122, 2002. *page 56*
- [97] C. K. Law, C. J. Sung, G. Yu, and R. L. Axelbaum. On the structural sensitivity of purely strained planar premixed flames to strain rate variations. *Combustion and Flame*, 98(1-2) :139–154, 1994. *page 57*
- [98] C. J. Sung, J. B. Liu, and C. K. Law. On the scalar structure of nonequidiffusive premixed flames in counterflow. *Combustion and Flame*, 106(1-2) :168–183, 1996. *pages 57, 58 et 241*
- [99] G.R.A. Groot and L.P.H. De Goey. A computational study on propagating spherical and cylindrical premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1445–1451, 2002. *pages 58, 59, 132 et 241*

- [100] F. Wu, W.i Liang, Z. Chen, Y. Ju, and C. K. Law. Uncertainty in stretch extrapolation of laminar flame speed from expanding spherical flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1) :663–670, 2015. page 59
- [101] Z. Chen and Y. Ju. Theoretical analysis of the evolution from ignition kernel to flame ball and planar flame. *Combustion Theory and Modelling*, 11 :427–435, 2007. page 60
- [102] Z. Chen, M.l P. Burke, and Y. Ju. Effects of lewis number and ignition energy on the determination of laminar flame speed using propagating spherical flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1) :1253–1260, 2009. page 60
- [103] H. Zhang, P. Guo, and Z. Chen. Critical condition for the ignition of reactant mixture by radical deposition. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(2) :3267–3275, 2013. page 60
- [104] W. Zhang, Z. Chen, and W. Kong. Effects of diluents on the ignition of premixed h₂/air mixtures. *Combustion and Flame*, 159(1) :151–160, 2012. page 60
- [105] A.P. Kelley, G. Jomaas, and C.K. Law. Critical radius for sustained propagation of spark-ignited spherical flames. *Combustion and Flame*, 156 :1006–1013, 2009. page 60
- [106] H.H. Kim, S. H. Won, J. Santner, Z. Chen, and Y. Ju. Measurements of the critical initiation radius and unsteady propagation of n-decane/air premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1) :929–936, 2013. page 60
- [107] D. Bradley and F. K. K. Lung. Spark ignition and the early stages of turbulent flame propagation. *Combustion and Flame*, 69(1) :71–93, 1987. page 60
- [108] K. Maruta. Micro and mesoscale combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1) :125–150, 2011. page 61
- [109] Z. Chen and Y. Ju. Effects of compression and stretch on the determination of laminar flame speeds using propagating spherical flames. *Combustion Theory and Modelling*, 13 :343–343, 2009. page 61
- [110] M.l P. Burke, Z. Chen, Y. Ju, and F. L. Dryer. Effect of cylindrical confinement on the determination of laminar flame speeds using outwardly propagating flames. *Combustion and Flame*, 156(4) :771–779, 2009. pages 61, 62 et 241
- [111] Z. Chen, M.P. Burke, and Y. Ju. Effects of compression and stretch on the determination of laminar flame speeds using propagating spherical flames. *Combustion Theory and Modelling*, 13(No. 2) :343–364, 2009. page 62

- [112] L. He. Critical conditions for spherical flame initiation in mixtures with high lewis numbers. *Combustion Theory and Modelling*, 4 :159–172, 2000. *page 62*
- [113] D. Bradley, R. A. Hicks, M. Lawes, C. G. W. Sheppard, and R. Woolley. The measurement of laminar burning velocities and markstein numbers for iso-octane-air and iso-octane-n-heptane-air mixtures at elevated temperatures and pressures in an explosion bomb. *Combustion and Flame*, 115(1-2) :126–144, 1998. 0010-2180 doi : DOI : 10.1016/S0010-2180(97)00349-0. *pages 62 et 63*
- [114] Z. Liang, W. and Chen, F. Yang, and H. Zhang. Effects of solet diffusion on the laminar flame speed and markstein length of syngas/air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1) :695–702, 2013. *pages 72 et 211*
- [115] R.J. Kee, J.F. Grcar, M.D. Smooke, and J.A. Miller. A fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames. Technical report, Sandia National Laboratory Report SAND85-8240, 1985. *pages 72 et 81*
- [116] S. B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1(1) :41–63, 1997. *page 73*
- [117] B. Yang and S. B. Pope. Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms - in situ adaptive tabulation in principal directions - premixed combustion. *Combustion and Flame*, 112(1-2) :85–112, 1998. *page 73*
- [118] D. Poitou. *Modélisation du rayonnement dans la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente*, <http://ethesis.inp-toulouse.fr/archive/00001019/01/poitou.pdf>. PhD thesis, 2009. *page 75*
- [119] F. Liu, G. J. Smallwood, and O. L. Gulder. Application of the statistical narrow-band correlated-k method to non-grey gas radiation in co₂-h₂o mixtures : approximate treatments of overlapping bands. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 68(4) :401–417, 2001. *page 78*
- [120] M. F. Modest. Narrow-band and full-spectrum k-distributions for radiative heat transfer-correlated-k vs. scaling approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 76(1) :69–83, 2003. *page 78*
- [121] F. Liu, M. Yang, G. J. Smallwood, and H. Zhang. Evaluation of the snb based full-spectrum ck method for thermal radiation calculations in co₂-h₂o mixtures. *In proceeding of Internatinal Center of Heat and Mass Transfer*, 2004. *page 78*

- [122] M. F. Modest and H. Zhang. The full-spectrum correlated-k distribution for thermal radiation from molecular gas-particulate mixtures. *Journal of Heat Transfer*, 124(1) :30–38, 2001. 10.1115/1.1418697. page 78
- [123] W. Malkmus. Random lorentz band model with exponential-tailed s-1 line-intensity distribution function. *Journal of the Optical Society of America*, 57(3) :323–329, 1967. page 78
- [124] A. A. Lacis and V. Oinas. A description of the correlated k distribution method for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres. *Journal of Geophysical Research : Atmospheres*, 96(D5) :9027–9063, 1991. page 78
- [125] H. C. Hottel and A. F. Sarofim. *Radiative Transfer*. McGraw-Hill, New York, 1967. page 78
- [126] D. K. Edwards and A. Balakrishnan. Nongray radiative transfer in a turbulent gas layer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16(5) :1003–1015, 1973. page 78
- [127] V. P. Solovjov and B.W. Webb. Slw modeling of radiative transfer in multicomponent gas mixtures. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 65(4) :655–672, 2000. page 78
- [128] F. N. Egolfopoulos. Geometric and radiation effects on steady and unsteady strained laminar flames. *Symposium (International) on Combustion*, 25(1) :1375–1381, 1994. page 80
- [129] L.R. Petzold. *A Description of DASSL : A Differential/Algebraic System Solver*. Scientific Computing. R.S. Stepleman et al. (Eds.), North-Holland, Amsterdam, 1983. page 80
- [130] M. Berzins, P. J. Capon, and P. K. Jimack. On spatial adaptivity and interpolation when using the method of lines. *Applied Numerical Mathematics*, 26(1-2) :117–133, 1998. page 80
- [131] J. M. Hyman, S. Li, and L. R. Petzold. An adaptive moving mesh method with static rezoning for partial differential equations. *Computers & Mathematics with Applications*, 46(10-11) :1511–1524, 2003. page 80
- [132] H. Wang, X. You, A. V. Joshi, S. G. Davis, A. Laskin, F. N. Efolopoulos, and C. K. Law. USC Mech Version II. *High-Temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C₁-C₄ Compounds*, [http : //ignis.usc.edu/USC_Mech_I.html](http://ignis.usc.edu/USC_Mech_I.html), May 2007. page 80
- [133] B. Sirjean, E. Dames, D. A. Sheen, X. Youand, C. Sungand, A.T. Holley, F.N. Egolfopoulos, H. Wang, S.S. Vasu, D.F. Davidson, R.K. Hansonand, H. Pitsch, C.T. Bowman,

- A. Kelley, C.K. Lawand, W. Tsang, N.P. Ernansky, D.L. Miller, A. Violi, and R.P. Lindstedt. A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane oxidation, jetsurf version 1.0, <http://melchior.usc.edu/jetsurf/jetsurf1.0/index.html>. *page 80*
- [134] T. Lu and C. K. Law. A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :1333–1341, 2005. *page 80*
- [135] Z. Chen. *Studies on the Initiation, Propagation, and Extinction of Premixed Flames*. PhD thesis, 2009. *pages 81 et 82*
- [136] G. Strang. On the construction and comparison of difference schemes. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 5(3) :506–517, 1968. *page 81*
- [137] E.F. Toro. *Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics*. Springer, 1999. *page 81*
- [138] S. Gottlieb and C. Shu. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Mathematics of Computation*, 67 :73–85, 1998. *page 81*
- [139] B. van Leer. On the relation between the upwind-differencing schemes of godunov, engquist-osher and roe. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 5(1) :1–20, 1984. *page 81*
- [140] P. N. Brown, G. D. Byrne, and A. C. Hindmarsh. Vode : a variable-coefficient ode solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 10(5) :1038–1051, 1989. *page 81*
- [141] R.J. Kee, F.M. Rupley, and J.A. Miller. Chemkin-ii : A fortran package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Technical report, Sandia National Laboratory Report SAND89-8009B, 1989. *page 81*
- [142] C.J. Sun and C.K. Law. On the consumption of fuel pockets via inwardly-propagating flames. In *Proceedings of the Combustion Institute, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 963–970. *pages 81 et 91*
- [143] M. Sun and K. Takayama. Conservative smoothing on an adaptive quadrilateral .d. *Journal of Computational Physics*, 150(1) :143–180, 1999. *pages 81 et 91*
- [144] Y. Ju, J. Yuan, H. Kobayashi, and G. Masuya. *On the Non-Reflective Boundary Conditions for Chemically Reactive Flows*. Fluid Dynamics and Co-located Conferences. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2003. doi :10.2514/6.2003-3969. *page 81*

- [145] Z. Chen and Y. Ju. Combined effects of curvature, radiation, and stretch on the extinction of premixed tubular flames. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51(25-26) :6118–6125, 2008. page 82
- [146] <http://www.coria.cfd.fr/index.php/YALES2>. pages 82 et 88
- [147] L. Quartapelle and Selmin V. High order taylor-galerkin methods for non-linear multidimensional problems. *Pineridge, Swansea*, 1993. page 83
- [148] H. A. Van Der Vorst. Parallel Iterative Solution Methods for Linear Systems arising from Discretized PDE's. *Special Course on Parallel Computing in CFD*, June 2001. page 83
- [149] R. Nicolaides. Deflation of Conjugate Gradients with Applications to Boundary Value Problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 24(2) :355–365, 1987. page 83
- [150] M. Malandain, N. Maheu, and V. Moureau. Optimization of the deflated conjugate gradient algorithm for the solving of elliptic equations on massively parallel machines. *Journal of Computational Physics*, 238(0) :32 – 47, 2013. page 83
- [151] R. Yu, J. Yu, and X. Bai. An improved high-order scheme for DNS of low Mach number turbulent reacting flows based on stiff chemistry solver. *Journal of Computational Physics*, 231(16) :5504–5521, 2012. page 84
- [152] A. C. Hindmarsh S. D. Cohen. Cvode, a stiff/nonstiff ode solver in c. *SciCADE95, Stanford University*. page 84
- [153] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtis, and R. B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. and Sons, New York, 1969. page 84
- [154] G. Lacaze. *Simulations aux Grandes Echelles de l'allumage de moteur fusées cryotechniques*. PhD thesis, 2009. page 84
- [155] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiotdesjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156(2) :292–301, 2009. page 85
- [156] S. Chandrasekhar. *Dover Publications Inc.* Dover Publications Inc., Mineola, NY, 1960. page 88
- [157] K. A. Jensen, J.-F. Ripoll, A. A. Wray, D. Joseph, and M. El Hafi. On various modeling approaches to radiative heat transfer in pool fires. *Combustion and Flame*, 148(4) :263–279, 2007. page 88

- [158] B. Abramzon and W. A. Sirignano. Droplet vaporization model for spray combustion calculations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 32(9) :1605–1618, September 1989. page 89
- [159] G.L. Hubbard, V.E. Denny, and A.F. Mills. Droplet evaporation : effects of transients and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18(9), 1975. page 89
- [160] N. Enjalbert. *Modélisation avancée de la combustion turbulente diphasique en régime de forte dilution par les gaz br \tilde{A} lés*. PhD thesis, 2011. page 89
- [161] B. Galmiche. *Caractérisation expérimentale des flammes laminaires et turbulentes en expansion*, https://tel.archives-ouvertes.fr/file/index/docid/1069403/filename/benedicte.galmiche_3574.pdf. PhD thesis, 2014. page 94
- [162] F.-Q. Zhao and H. Hiroyasu. The applications of laser rayleigh scattering to combustion diagnostics. *Progress in Energy and Combustion Science*, 19(6) :447–485, 1993. pages 104, 105 et 106
- [163] W. C. Gardiner, Y. Hidaka, and T. Tanzawa. Refractivity of combustion gases. *Combustion and Flame*, 40 :213–219, 1981. page 106
- [164] R. S. Barlow, G. H. Wang, P. Anselmo-Filho, M. S. Sweeney, and S. Hochgreb. Application of raman/rayleigh/lif diagnostics in turbulent stratified flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1) :945–953, 2009. page 107
- [165] E. Varea. *Experimental analysis of laminar spherically expanding flames*. PhD thesis, 2013. pages 117, 118, 127, 131, 132, 133, 134, 181 et 243
- [166] GUM. *Evaluation of measurement data - Guide to the expression of uncertainty in measurement*. JCGM 100, 2008. page 121
- [167] G. Boutin. *Mélange et micro-mélange dans un réacteur \tilde{A} multiples jets cisailés*. PhD thesis, 2010. page 123
- [168] S. Suzuki and K. Abe. Topological structural analysis of digital binary images by border following. *Computer Vision, Graphics and Image Processing*, 30 :32–46, 1985. page 128
- [169] A. Razet. Méthode des moindres carrés appliquée au cercle pour une utilisation en interférométrie. *Bulletin du bureau national de métrologie*, 1997. page 129

- [170] J. Beeckmann. Optimization, understanding, and accuracy of the spherical vessel systems across europe. In *3rd Heat Flux Burner Workshop, Berlin, September 25th, 2014*. page 135
- [171] K.J. Bosschaart and L.P.H. de Goey. The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method. *Combustion and Flame*, 136 :261–269, 2004. page 136
- [172] A. Trouvé and T. Poinso. The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 278 :1–31, 1994. pages 155 et 156
- [173] H. Kolera-Gokula and T. Echehki. Direct numerical simulation of premixed flame kernel-vortex interactions in hydrogen-air mixtures. *Combustion and Flame*, 146 :155–167, 2006. pages 155 et 156
- [174] J.B. Bell, R.K. Cheng, M.S. Day, and I.G. Shepherd. Numerical simulation of lewis number effects on lean premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1309–1317, 2007. pages 155 et 156
- [175] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(3) :193–266, 2002. page 155
- [176] K.N.C. Bray. Studies of the turbulent burning velocity. *Proceedings of the Royal Society of London A*, 431 :315–335, 1990. page 155
- [177] J. Tien and M. Matalon. On the burning velocity of stretched flames. *Combustion and Flame*, 84 :238–248, 1991. page 155
- [178] B. Fiorina, R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante. A filtered tabulated chemistry model for les of premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157 :465–475, 2010. page 155
- [179] V. Subramanian, P. Domingo, and L. Vervisch. Large eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner. *Combustion and Flame*, 157 :579–601, 2010. page 155
- [180] P. Quillatre, O. Vermorel, T. Poinso, and P. Ricoux. Large eddy simulation of vented deflagration. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52(33) :11414–11423, 2013. page 155
- [181] A.R. Kerstein, W.T. Ashurst, and F.A. Williams. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Phys. Rev. A*, 37 :2728–2731, Apr 1988. page 156
- [182] H.G. Im, T.S. Lund, and J.H. Ferziger. Large eddy simulation of turbulent front propagation with dynamic subgrid models. *Physics of Fluids (1994-present)*, 1997. page 156

- [183] J.W. Linnett. The determination of fundamental speeds and the mechanism of flame propagation, 1954. *page 172*
- [184] S. Candel. *Mecanique des fluides*. DUNOD, 1995. *page 173*
- [185] Z. Chen, X. Qin, O. Xu, Y. Ju, and F. Liu. Studies of radiation absorption on flame speed and flammability limit of co2 diluted methane flames at elevated pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2) :2693–2700, 2007. *pages 195, 196, 197, 235 et 246*
- [186] Y. Xin, C.J. Sung, and C.K. Law. A mechanistic evaluation of soot diffusion in heptane/air flames. *Combustion and Flame*, 159(7) :2345–2351, 2012. *page 210*
- [187] F. Yang, H. Q. Zhang, and X. L. Wang. Effects of soot diffusion on the laminar flame speed of n-butane-air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1) :947–953, 2011. *page 211*
- [188] C.K. Law, P. Cho, M. Mizomoto, and H. Yoshida. Flame curvature and preferential diffusion in the burning intensity of bunsen flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 21 :1803–1809, 1988. *page 211*
- [189] B.A. Williams. Sensitivity of calculated extinction strain rate to molecular transport formulation in nonpremixed counterflow flames. *Combustion and Flame*, 124(1-2) :330–333, 2001. *page 211*
- [190] F. Yang, C. K. Law, C. J. Sung, and H. Q. Zhang. A mechanistic study of soot diffusion in hydrogen-air flames. *Combustion and Flame*, 157(1) :192–200, 2010. *pages 211, 213, 214, 217, 220 et 236*
- [191] M. Kuznetsov, S. Kobelt, J. Grune, and T. Jordan. Flammability limits and laminar flame speed of hydrogen-air mixtures at sub-atmospheric pressures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(22) :17580–17588, 2012. *page 219*
- [192] J. Jayachandran, A. Lefebvre, R. Zhao, F. Halter, E. Varea, B. Renou, and F. N. Egolfopoulos. A study of propagation of spherically expanding and counterflow laminar flames using direct measurements and numerical simulations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 35(1) :695–702, 2015. *page 222*
- [193] C.K. Law. *Combustion Physics*. Cambridge University Press, 2010. *page 228*
- [194] G. Ribert, O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Veynant. Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed flames. *Combustion and Flame*, 146(4) :649 – 664, 2006. *page 237*

- [195] K. Wang, G. Ribert, P. Domingo, and L. Vervisch. Self-similar behavior and chemistry tabulation of burnt-gas diluted premixed flamelets including heat-loss. *Combustion Theory and Modelling*, 14(4) :541–570, 2010. *page 237*
- [196] G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch, and Y.S. Niu. Hybrid transported-tabulated strategy to downsize detailed chemistry for numerical simulation of premixed flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 92(1) :175–200, 2013. *page 237*

Résumé

Les enjeux environnementaux et sociétaux de la combustion de combustibles fossiles pour la production d'énergie (électrique, chauffage ou transport), nécessitent le développement de nouveaux modes de combustion, de nouvelles technologies de brûleurs et de combustibles alternatifs (gazéification de la biomasse, biofuels, ...). Pour caractériser la combustion pré-mélangé de ces nouveaux moyens de production, la vitesse de combustion laminaire est un des paramètres fondamentaux utilisés. Cette vitesse est une donnée macroscopique de référence, utile pour le processus de validation et d'amélioration des schémas cinétiques ainsi qu'un paramètre d'entrée de la plupart des codes de combustion turbulente. Mais bien qu'étudié depuis plus de 100 ans, la détermination expérimentale précise de cette vitesse reste encore un défi de par les limitations inhérentes aux configurations expérimentales utilisés.

Dans ce contexte, les objectifs de ces travaux de thèse concernent l'étude, l'analyse et la caractérisation des techniques de détermination de la vitesse de combustion laminaire à partir des flammes en expansion sphérique et proposent une réflexion sur la minimisation de l'ensemble des sources d'incertitudes. Dans une première partie, le formalisme des définitions des vitesses de flamme laminaire existantes dans cette configuration est rappelé afin de définir les facteurs d'incertitudes liés à la mesure expérimentale de ces vitesses. Dans une seconde partie, les différents dispositifs numériques et expérimentaux utilisés au cours de cette thèse sont présentés. Enfin une troisième partie présente une nouvelle définition rigoureuse de la vitesse de consommation et une nouvelle méthodologie pour la mesurer. Ainsi qu'une étude de différents facteurs d'incertitudes.

Abstract

Environmental and social challenges concerning the combustion of fossil fuels for energy production (electricity, building and transport) require the development of new combustion processes, new burner technologies and alternative fuels (gasification of biomass, biofuels, ...). Laminar burning velocity is one of the fundamental parameters used to characterize premixed combustion for these new fuels. This speed is a reference for the validation and improvement of kinetic schemes and an input parameter to estimate the turbulent burning velocity of most turbulent combustion codes. But even if it has been studied over 100 years, the precise experimental measurement of this velocity is still complicated due to inherent limitations in experimental configurations used, especially for high pressure and temperature conditions.

In this context, this thesis work focuses on the study, analysis and characterization of the different techniques used to determine the laminar burning velocity from spherically expanding flames and proposes a reflection on the minimization of uncertainties. In the first part, the formalism of existing laminar flame speeds in spherical expanding configuration is reminded to define the factors of uncertainty related to the experimental measurement (local kinematic and global kinetic variables). In the second part, several numerical and experimental devices used in this thesis are presented. Finally, in the third part, a rigorous definition of the consumption speed is proposed with a new methodology to measure it. And different uncertainty factors are studied in detailed.