



HAL
open science

Modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium et application sur la post-combustion d'une charge explosive condensée dans l'air

Jimmy Suarez

► **To cite this version:**

Jimmy Suarez. Modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium et application sur la post-combustion d'une charge explosive condensée dans l'air. Autre. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2020. Français. NNT : 2020INPT0099 . tel-04171492

HAL Id: tel-04171492

<https://theses.hal.science/tel-04171492v1>

Submitted on 26 Jul 2023

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (Toulouse INP)

Discipline ou spécialité :

Energétique et transferts

Présentée et soutenue par :

M. JIMMY SUAREZ

le mercredi 30 septembre 2020

Titre :

Modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium et application sur la post-combustion d'une charge explosive condensée dans l'air.

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

Directeur(s) de Thèse :

M. LAURENT SELLE

M. THIERRY POINSOT

Rapporteurs :

M. ASHWIN CHINNAYYA, ENSMA POITIERS

M. CHRISTIAN CHAUVEAU, CNRS ORLEANS

Membre(s) du jury :

M. MICHEL ARRIGONI, ENSTA BRETAGNE, Président

M. LAURENT SELLE, CNRS TOULOUSE, Membre

Mme BENEDICTE CUENOT, CERFACS, Membre

Mme MARIE-CHRISTINE SAINTE CATHERINE, , Invité

M. SEBASTIEN COURTIAUD, CEA GRAMAT, Membre

M. THIERRY POINSOT, CNRS TOULOUSE, Invité

Table des matières

Remerciements	11
Résumé	13
Introduction	15
I Mise en place de l'analyse	21
1 Notions pour la combustion de l'aluminium	23
1.1 Étude bibliographique	23
1.1.1 Les régimes de combustion	23
1.1.2 Quelques cas expérimentaux	25
1.1.2.1 Flamme de type « bec Bunsen »	25
1.1.2.2 Flamme de type « colonne »	26
1.1.2.3 Combustion d'une particule isolée	27
1.1.3 Quelques cas numériques	29
1.1.3.1 Particules d'aluminium dans les moteurs à propergols	29
1.1.3.2 Flamme numérique de type « colonne »	31
1.1.3.3 Combustion numérique d'une particule isolée	32
1.1.4 Analyse sur les propriétés des flammes d'aluminium	32
1.1.4.1 Durée et température d'allumage	32
1.1.4.2 Durée de combustion d'une particule	34
1.1.4.3 Température de flamme	36
1.1.4.4 Vitesse de flamme	37
1.1.4.5 Résidus de combustion	38
1.2 Propriétés physiques et thermodynamiques	39
1.2.1 Aluminium	39
1.2.1.1 Aluminium solide	39
1.2.1.2 Aluminium liquide	39
1.2.1.3 Aluminium gazeux	41
1.2.2 Combustion de l'aluminium	41
1.2.3 Oxydes d'aluminium	43
1.2.3.1 Alumine	43
1.2.3.2 Autres oxydes d'aluminium	44
1.3 Conclusion sur la combustion de l'aluminium avec l'air	45
2 Notions sur la post-combustion des charges explosives	47
2.1 De l'explosif à la post-combustion	47
2.1.1 Explosifs	47
2.1.1.1 Définition	47
2.1.1.2 Types d'explosifs	47

2.1.1.3	Répartition de l'aluminium au sein de l'explosif	48
2.1.2	Détonation	50
2.1.2.1	Modélisation de l'onde de détonation	50
2.1.2.2	Onde de détonation dans un explosif sphérique	51
2.1.3	Post-combustion	52
2.1.3.1	Phénoménologie de la post-combustion	52
2.1.3.2	Enjeux liés à la post-combustion	54
2.1.3.3	Réactions de combustion	54
2.1.3.4	Instabilités hydrodynamiques de la boule de feu	55
2.1.4	Onde de choc aérienne générée par une détonation	57
2.2	L'aluminium au sein de la post-combustion	59
2.2.1	Effet des particules d'aluminium sur la détonation	59
2.2.2	Contribution énergétique de l'aluminium	61
2.2.3	Mesures expérimentales	62
2.2.4	Modélisation de la post-combustion avec des particules d'aluminium	64
2.3	Conclusion sur la post-combustion d'après la littérature	67
3	Outils et modèles exploités	69
3.1	Principaux outils	69
3.1.1	AVBP	69
3.1.2	CANTERA	69
3.1.3	ALEXIA	69
3.2	Modélisation de la phase gazeuse	70
3.2.1	Système d'équations	70
3.2.2	Modélisation des coefficients de transport	71
3.2.3	Modélisation de la combustion	71
3.2.4	Méthodes numériques	73
3.2.4.1	Schémas numériques	73
3.2.4.2	Conditions aux limites	74
3.2.5	Modèle d'épaississement de flamme	74
3.2.6	Viscosité artificielle	75
3.3	Modélisation de la phase dispersée	75
3.3.1	Formalisme lagrangien	75
3.3.2	Système d'équations du formalisme lagrangien	76
3.3.3	Interaction entre phases porteuse et dispersée	76
3.3.4	Dynamique d'une particule isolée	78
3.3.5	Force de traînée	78
3.3.6	Évaporation d'une goutte	82
3.3.6.1	Évolution de la masse de la goutte	83
3.3.6.2	Évolution de la température de la goutte	84
3.3.6.3	Prise en compte de l'écoulement autour de la particule	86
3.3.6.4	Fin de l'évaporation	86
3.3.6.5	Choix des paramètres d'évaporation	87
3.3.7	Modélisation de la condensation	87
3.3.8	Fusion d'un solide	88
3.3.9	Rayonnement	88
3.4	Modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium	89
3.4.1	Modélisation développée au cours de cette thèse	89
3.4.2	Modèle simplifié avec cinétique globale	90
3.5	Post-traitement de la post-combustion	92
3.5.1	Structure du script de post-traitement	92
3.5.2	Phase gazeuse	93
3.5.3	Phase liquide	93

II	Étude numérique de la combustion de particules d'aluminium	95
4	Étude numérique 0D de la combustion de l'aluminium	97
4.1	Mise en place des cas 0D	97
4.1.1	Cas d'étude	97
4.1.2	Domaine de calcul	98
4.2	Décomposition de la combustion diphasique de l'aluminium	99
4.2.1	Validation des changements de phase : Cas 1	99
4.2.2	Combustion de l'aluminium gazeux avec de l'air : Cas 2	101
4.3	Combustion stœchiométrique de l'aluminium avec l'air	102
4.3.1	Combustion de l'aluminium pré-chauffé : Cas 3	103
4.3.2	Vérification numérique du nombre de particules suivies : Cas 16 et 17	106
4.4	Influence de la condensation de l'alumine	106
4.4.1	Combustion de l'aluminium sans germe d'alumine : Cas 4	106
4.4.2	Variation du nombre de germes d'alumine : Cas 5 à 10	107
4.5	Influence de la taille des particules d'aluminium	109
4.5.1	Variation de la taille des particules : Cas 11 à 15	110
4.5.2	Particules d'aluminium de petite taille : Cas 11	111
4.6	Conclusion sur la combustion 0D	112
5	Étude numérique 1D de flammes aluminium-air	115
5.1	Mise en place des simulations 1D	115
5.1.1	Cas d'étude	115
5.1.2	Domaine de calcul	116
5.1.3	Initialisation de la flamme 1D	117
5.2	Flamme 1D stœchiométrique de référence : Cas 1	117
5.2.1	Structure de la flamme	118
5.2.2	Composition de la flamme	121
5.2.3	Influence de la résolution du maillage : Cas 2	123
5.2.4	Effet du rayonnement : Cas 3	124
5.3	Variation de la richesse : Cas 4 à 7	125
5.3.1	Calcul de la richesse	126
5.3.2	Effet sur la vitesse de flamme	126
5.3.3	Effet sur la température de flamme	127
5.4	Variation de la taille des particules : Cas 8 à 11	128
5.4.1	Effet sur la vitesse de flamme	128
5.4.2	Effet sur la température de flamme	129
5.4.3	Effet sur la structure de la flamme	130
5.5	Variation de la température des gaz frais : Cas 12 à 17	132
5.5.1	Influence sur la vitesse de flamme	132
5.5.2	Influence sur la température de flamme	133
5.5.3	Influence sur la composition des phases	134
5.6	Variation du nombre de germes d'alumine : Cas 18 à 50	135
5.6.1	Effet du nombre de particules d'alumine suivies	135
5.6.2	Effet du rapport R_{germe}	136
5.6.2.1	Profil de température de la flamme	136
5.6.2.2	Température et vitesse de flamme	137
5.7	Conclusion sur la flamme 1D aluminium-air	138

6	Étude numérique 2D de flammes aluminium-air	141
6.1	Présentation de la flamme aluminium-air de référence	141
6.1.1	Dispositif expérimental	141
6.1.1.1	Description globale	141
6.1.1.2	Sortie du brûleur	142
6.1.1.3	Générateur d'aérosol	143
6.1.1.4	Poudre d'aluminium utilisée	144
6.1.1.5	Procédure d'allumage de la flamme aluminium-air	144
6.1.2	Résultats de l'étude	145
6.1.2.1	Structure de la flamme	145
6.1.2.2	Température de flamme	146
6.1.2.3	Vitesse de flamme	146
6.2	Mise en place de la simulation 2D	147
6.2.1	Domaine de calcul	147
6.2.2	Injection des particules et de l'air	149
6.2.3	Initialisation de la flamme	150
6.3	Flamme stœchiométrique aluminium-air	153
6.3.1	Température du gaz	153
6.3.2	Vitesse du gaz	154
6.3.3	Particules d'aluminium	155
6.3.4	Particules d'alumine	156
6.3.5	Taux de dégagement de chaleur lié aux réactions de combustion	158
6.4	Comparaison avec le cas expérimental	159
6.4.1	Structure et caractéristiques de la flamme	159
6.4.2	Déformation de la surface de la flamme	160
6.5	Conclusion sur la modélisation de la flamme 2D aluminium-air	162
 III Participation de la combustion de l'aluminium lors de la post-combustion de charges explosives contenant un additif métallique		165
7	Étude de la dispersion de particules durant la post-combustion	167
7.1	Mise en place des simulations de post-combustion avec particules non réactives	168
7.1.1	Cas d'étude	168
7.1.2	Domaine de calcul	168
7.1.3	Initialisation de la boule de feu	169
7.1.4	Modélisation de la combustion	170
7.2	Post-combustion sans particules : Cas 1	171
7.3	Post-combustion avec des particules inertes : Cas 2	174
7.3.1	Diagramme de marche avec la dispersion des particules	175
7.3.2	Suivi temporel de la vitesse des particules	176
7.4	Post-combustion avec des particules d'aluminium de dimensions variables : Cas 3 et 4	178
7.4.1	Grosses particules : Cas 3	178
7.4.2	Distribution de taille polydisperse : Cas 4	180
7.5	Conclusion sur la dispersion des particules durant la post-combustion	182
8	Post-combustion avec des particules d'aluminium réactives	183
8.1	Présentation du modèle de combustion isolée	183
8.1.1	Description	183
8.1.2	Combustion 0D	184
8.2	Post-combustion avec des particules d'aluminium réactives	186
8.2.1	Initialisation de la post-combustion	186
8.2.2	Diagramme de marche	186
8.2.3	Onde de choc secondaire	188

<i>TABLE DES MATIÈRES</i>	7
8.2.4 Chaleur dégagée par la post-combustion	189
8.3 Conclusion la post-combustion avec des particules réactives	189
IV Conclusion et Perspectives	191
A Tables CHEMKIN pour l'aluminium et les oxydes d'aluminium	202
B Schéma réactionnel complet de combustion d'aluminium de Swihart-Catoire	204

Table des notations

Symbole	Définition	Unité
Lettres latines majuscules		
C_p	Capacité calorifique à pression constante	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
C_v	Capacité calorifique à volume constant	$J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$
D	Vitesse de détonation	$m \cdot s^{-1}$
D_j	Diffusion moléculaire	$m^2 s^{-1}$
E	Energie totale d'un système	J
E_a	Energie d'activation	$J \cdot mol^{-1}$
Le	Nombre de LEWIS	–
G	Enthalpie libre	$J \cdot kg^{-1}$
H	Enthalpie totale	$J \cdot kg^{-1}$
H_r	Enthalpie de réaction	$J \cdot kg^{-1}$
I	Matrice identité	–
M_i	Masse molaire de l'espèce i	$g \cdot mol^{-1}$
P_*	Pression	Pa
Pr	Nombre de Prandtl	–
S	Entropie	$J \cdot K^{-1} \cdot kg^{-1}$
S_c	Nombre de SCHMIDT	–
S_f	Vitesse de flamme	$cm \cdot s^{-1}$
R	Constante universelle des gaz parfait	$J \cdot mol^{-1} K^{-1}$
R_{germe}	Rapport entre les nombres de germes d'alumine et de particules d'aluminium	–
T_*	Température	K
T_i	Température initiale	K
T_a	Température d'activation	K
T_f	Température de flamme	K
T_{fus}	Température de fusion	K
T_{vap}	Température de vaporisation	K
X_i	Fraction molaire de l'espèce i	–
Y_i	Fraction massique de l'espèce i	–
Z	Facteur de fréquence	s^{-1}
Lettres latines minuscules		
c	Vitesse du son	$m \cdot s^{-1}$
d_{32}	Diamètre de SAUTER d'une particule	μm
d_G	Diamètre moyen géométrique d'une particule	μm
d_p	Diamètre de particule	μm
$d_{p,i}$	Diamètre initiale d'une particule	μm
$d_{p,vap}$	Diamètre limite d'une particule pour le régime de combustion	μm
e	Energie interne spécifique	$J \cdot kg^{-1}$
g	Accélération de la pesanteur	$m \cdot s^{-2}$
k_b	Constante de Boltzmann	$J \cdot K^{-1}$
r	Rayon d'une particule ou de la boule de feu	m
t	Temps	s
t_b	Temps de combustion	s
u_*	Vitesse matérielle	$m \cdot s^{-1}$
v_*	Volume massique	$m^3 \cdot kg^{-1}$

Symbole	Définition	Unité
Lettres grecques majuscules		
Γ	Coefficient de Grüneisen	–
$\Omega^{(2,2)*}$	Intégration réduite de collision	–
Φ	Richesse du mélange	–
Lettres grecques minuscules		
δ_f	Épaisseur de flamme	m
λ	Conductivité thermique	$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{H}^{-1}$
ρ	Masse volumique	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
μ	Viscosité dynamique	Pa·s
σ	Paramètre de longueur dans le potentiel d'interaction	$\text{Å}=0,1 \text{ nm}$
σ_G	Écart type géométrique	m
ϵ	Tenseur des déformations infinitésimales	s^{-1}
τ	Partie déviatorique du tenseur des contraintes	Pa

Remerciements

Ces 3 années de thèse n'auraient pas été possibles sans de nombreux soutiens du côté professionnel et du côté personnel. Cette page leur est dédiée pour les remercier comme il se doit.

Tout d'abord je remercie le CEA (Commissariat de l'Énergie Atomique et aux énergies Alternatives), l'AID (Agence de l'Innovation et de la Défense) et la région Occitanie qui ont financé ce projet et m'ont permis de vivre l'aventure qu'est la thèse. Je remercie les membres de mon jury, C. CHAUVEAU, A. CHINNAYYA, B. CUENOT et M. ARRIGONI d'avoir eu le courage de lire et d'évaluer mon manuscrit durant l'été. Cela a conduit à des échanges pertinents sur le sujet pendant et après la soutenance.

Ensuite, je tiens à remercier le groupe CEG/DEA/LDT du CEA centre de Gramat qui m'a accueilli en sortie d'école d'ingénieurs pour faire un super PFE (Projet de Fin d'étude) et m'a conduit progressivement vers mon sujet de thèse. Dans cette formidable équipe, je remercie A. OSMONT pour ses connaissances et sa culture qui m'ont permis de faire un projet et un mémoire de qualité. Je remercie N. LECYSYN qui m'a donné de précieux conseils pour présenter mes travaux de la façon la plus simple et pédagogique possible. Je remercie A. LEFRANCOIS qui partage avec passion ses connaissances dans le domaine de la détonation et avec qui j'ai regardé des vidéos de boules de feu pendant des heures. Je remercie G. BAUDIN qui a été une source d'idées pour mon projet de recherche, mais qui avait tendance à multiplier par 5 les voies de recherche à chaque réunion. Je remercie M. GENETIER qui m'a aidé de nombreuses fois sur l'analyse de la détonation et de la post-combustion de charge d'explosif condensé. Je remercie l'ensemble des doctorants et stagiaires que j'ai vu passer durant mes passages au CEA pour la bonne ambiance générale. Je remercie particulièrement S. POEUF dite "la mère des doctorants" qui avait toujours des discours sages. Je remercie B. ROUGIER, mon collègue de bureau adoré, qui me défiait à deviner les ingrédients dans des desserts vegans... Sacrée patate douce. Je remercie A. BOUBRIT et G. MEYER, les collègues de Brive-la-Gaillard, avec qui j'ai passé de super moments. Je remercie M. DABOS pour son énergie et son humour, avec qui je me suis bien amusé lors de l'APS à Portland en 2019 avec notre chef de randonnée N. LECYSYN. Le dernier membre de cette équipe qui mérite de grands remerciements est S. COURTIAUD qui est mon encadrant du côté CEA. Malgré les doutes que j'avais sur mes compétences et résultats de recherche, tu as toujours réussi à me motiver. Tu as été un super encadrant et merci encore pour ton aide lors de l'écriture du manuscrit.

Passons maintenant au laboratoire qui m'a accueilli pendant une grande partie de ma thèse, l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse. Dans le groupe MIR, je remercie T. SCHULLER pour son aide sur le projet et du fait qu'il vérifiait de temps en temps si je n'étais pas cuit dans mon bureau à cause du soleil toulousain. Je remercie T. POINSOT pour ses interventions et remarques qui ont toujours été d'une grande aide. Je remercie les différents doctorants et stagiaires qui sont passés dans le groupe pour l'ambiance générale qu'ils ont créée. Je remercie particulièrement mon collègue de bureau S. MARRAGOU pour sa gentillesse et son café quand je n'avais plus de dosette. Je m'excuse pour les nombreuses fois où j'ai tenu des propos indécents au PC à voix haute, une habitude que tu entretiens à merveille maintenant. Je remercie V. GOSSELIN pour nos échanges et désaccords sur le cinéma, où d'un côté je donnais trop de chance aux réalisateurs et toi tu les descendais un peu rapidement. Je remercie N. MONROLIN pour sa bonne humeur permanente et ses encouragements, c'était un vrai plaisir de te revoir de temps en temps après ta thèse. Je remercie D. SCHUSTER, autre collègue de bureau en garde partagée avec le CERFACS, qui m'écoutait me plaindre sur l'écriture des rapports et du manuscrit. Je remercie l'équipe "hydrogene power" comprenant

P.A. MASSET, T. YAHOU, A. ANIELLO, T. MORINIERE et F. MULLER, pour leur énergie et à qui j'ai essayé de vendre la combustion de l'aluminium pendant plus d'un an pour enfin réussir lors de la soutenance... (Le champagne a-t-il aidé?)... En dernier j'aimerais remercier particulièrement L. SELLE, mon directeur de thèse, mon mentor et mon tortionnaire. Malgré le sujet de recherche complexe et mon côté peu optimiste, tu ne m'as jamais lâché et as toujours trouvé les mots pour relancer la machine... Bon à vrai dire, il y a certaines citations qui sont toujours en cours de traitement mais je pense que l'ensemble est passé, dont " Si ça ne fonctionne pas, c'est que tu es le fautif" ou encore " Tu connais l'histoire du mec qui a perdu ses clés? ". On a vécu une belle aventure avec plein de rebondissements que je n'oublierai jamais et encore merci.

Durant mes travaux de thèse, j'ai pu entrer en contact avec divers laboratoires qui ont contribué à la réussite de ce projet. Premièrement je remercie le CERFACS et particulièrement le groupe LAGRANGE avec qui j'ai échangé pour mettre en place la combustion de l'aluminium dans AVBP. Grâce à eux, AVBP n'a pas trop souffert lors de la mise en place de la modélisation. Deuxièmement, je remercie l'équipe du CNRS-ICARE à Orléans qui nous a apporté une grande aide sur la compréhension de la flamme d'aluminium. Grâce à leurs résultats expérimentaux, à une visite de leurs dispositifs expérimentaux et à nos nombreux échanges, nos résultats numériques ont pu être valorisés dans ce manuscrit. Troisièmement, je remercie CALMIP de m'avoir attribué des heures de calculs nécessaires au projet et pour les formations sur l'utilisation des super-calculateurs. Enfin, je remercie le laboratoire IMT - Mines d'Alès qui m'a permis de voir un dispositif de flamme colonne et d'échanger sur la flamme d'aluminium.

Enfin arrive la famille et les amis qui ont contribué psychologiquement à la réalisation de ces travaux. Tout d'abord je remercie ma Mère et Régis, que je considère comme mon père, pour leur encouragement et leur aide tout au long de cette période. Merci pour les petits Week-end "retour à la maison" qui m'apportait un soulagement et me motivait pour la semaine suivante. Je remercie énormément Cyndelle qui est ma chérie, ma compagne de pacs et ma "youyoute". Merci de m'avoir soutenu pendant ces 3 années d'école d'ingénieurs et ces 3 années de doctorat. De même, je te remercie de m'avoir supporté en période de confinement lors de la phase la plus tranquille du doctorant qui est l'obtention des résultats finaux et écriture du manuscrit de thèse. T'es la meilleure, reste comme tu es. Je remercie aussi l'ensemble de ma famille et de ma belle-famille qui me lançaient des encouragements de temps en temps, mais qui ont contribué de façon non négligeable à cette réussite. Je remercie aussi mes amis chers de Rouen, le groupe Oldel, le groupe Kooples, mon binôme du cœur G. RUSCADE et mon vieil ami O. BALAGUIER. Pour finir, j'aimerais remercier mon grand-père Michel qui aurait été fier de moi et m'a accompagné dans mon cœur.

Résumé

La combustion de l'aluminium est un phénomène présent dans de nombreux domaines, tels que le domaine du spatial, de la défense et de l'automobile. Une fois allumée, une particule d'aluminium représente un excellent vecteur d'énergie pour l'écoulement environnant grâce à sa grande densité énergétique. Sa combustion avec l'air, ou avec d'autres oxydants, a fait l'objet de quelques études expérimentale et numérique, ce qui a mis en avant l'une des particularités de cette combustion diphasique. Lors de la combustion de l'aluminium, elle produit une espèce appelée alumine qui existe uniquement en phase liquide dans ses gaz brûlés. Cette particularité rend la modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium complexe à modéliser. L'objectif de cette thèse est divisé en deux parties. La première partie est de développer un modèle de combustion diphasique de l'aluminium avec l'air. Cette modélisation est une simulation Euler-Lagrange réalisée avec AVBP, qui est un code de simulation mis en place par le CERFACS. Elle prend en compte la combustion rapide de l'aluminium en phase gazeuse et les changements de phase qui interviennent comme la fusion et l'évaporation de l'aluminium, mais aussi la condensation et la solidification de l'alumine. Une méthode de germination est développée pour permettre la condensation de l'alumine dans les gaz brûlés et suivre de façon lagrangienne sa croissance derrière la flamme aluminium-air. Cette modélisation nous a permis de simuler des flammes aluminium-air 1D et 2D pour les comparer aux données expérimentales trouvées dans la littérature. La seconde partie de cette thèse est l'analyse de la dispersion et de la participation énergétique de l'aluminium dans la post-combustion d'une charge explosive. Le phénomène de post-combustion est très lumineux et rapide, ce qui empêche expérimentalement de connaître l'évolution de l'état des particules d'aluminium contenues initialement dans la charge explosive. Ces simulations permettent de suivre la dispersion des particules et leurs interactions avec les différentes phases qui composent la post-combustion. Un modèle de combustion de particule isolée est repris de la littérature et adapté à notre cas d'étude. Ainsi l'influence de la présence physique des particules et de la chaleur dégagée par leur combustion a pu être évaluée sur l'évolution de la boule de feu et la propagation du choc secondaire. L'ensemble de ces travaux de thèse, que ce soit pour la modélisation de la flamme aluminium-air et l'analyse de l'impact de l'aluminium sur la post-combustion, a montré des résultats convaincants par rapport aux données de la littérature. Les modèles numériques utilisés et développés sont prometteurs pour des futures études sur la combustion de l'aluminium.

Introduction

DU MÉTAL DANS LA COMBUSTION ?

La combustion est régulièrement associée à une flamme dont le combustible est un gaz ou des gouttes d'hydrocarbures, mais dans certains cas le combustible peut être du métal. Une fois fondu, le métal brûle avec son environnement. Ce phénomène est rencontré quotidiennement dans diverses applications. Dans le monde de la Formule 1, des patins en titane sont fixés sur le fond plat des monoplaces (Fig. 1 (a)). Ce patin frotte sur le sol pendant la course, ce qui conduit à lui arracher des particules chaudes et brûlant avec l'air pour former des étincelles spectaculaires. Dans le domaine du spectacle, les feux d'artifice peuvent utiliser des poudres métalliques pour apporter des couleurs uniques (Fig. 1 (b)), tels que le doré obtenu avec du fer et l'argenté obtenu avec du titane ou de l'aluminium. Dans le domaine industriel, la soudure émet de nombreuses étincelles qui sont en réalité des particules métalliques chaudes en combustion avec l'air (Fig. 1 (c)).

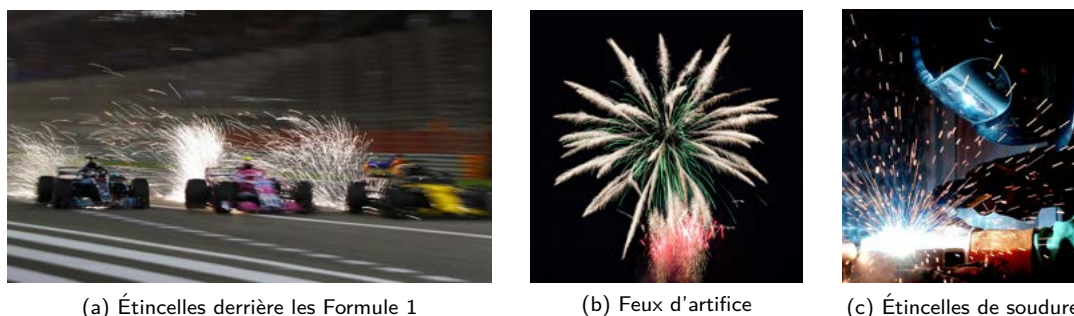


FIGURE 1 – Combustion du métal dans la vie quotidienne

Mis à part l'aspect visuel, les métaux sont des excellents vecteurs d'énergie pour la combustion. En comparant la densité énergétique de quelques métaux avec celles de l'hydrogène, des hydrocarbures et des batteries, les métaux montrent un grand potentiel (Fig. 2) [66]. Parmi ces métaux se trouve l'aluminium, qui n'est pas le métal le plus énergétique mais propose une densité énergétique trois fois supérieure à celle des hydrocarbures et dix fois supérieure à celle de l'hydrogène. Cette qualité est à l'origine de l'intérêt de nombreux domaines pour employer cette énergie à leur avantage. Toutefois, un métal génère des oxydes solides, ce qui limite l'effet de pression. Il faut donc allier le métal à un combustible classique pour avoir le plus d'effets possible.

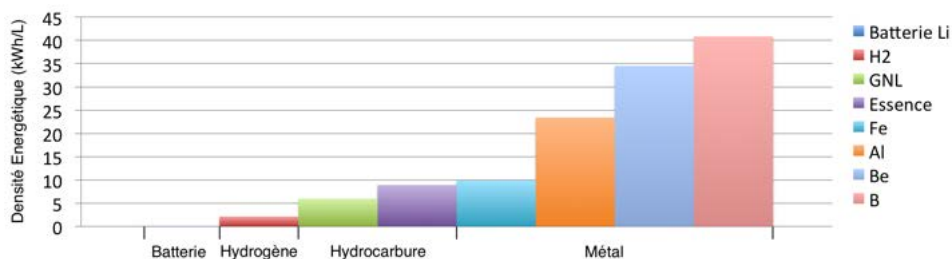


FIGURE 2 – Densité énergétique selon le combustible (valeurs extraites d'un graphique présent dans [66])

L'ALUMINIUM, UN COMBUSTIBLE MÉTALLIQUE...

La combustion de l'aluminium dégage de la chaleur. Cette combustion est possible avec une grande variété d'espèces [85]. L'aluminium va alors fondre, s'évaporer et brûler avec son environnement pour former des produits de combustion [98]. L'un de ces produits a une particularité qui rend cette combustion spéciale, puisqu'il est formé en phase condensée. Cette espèce est appelée alumine et se condense immédiatement après la combustion et se solidifie rapidement avec le refroidissement des gaz brûlés. Comme l'illustre la Fig. 3, l'aluminium initialement sous forme de poudre brûle avec son environnement et produit une poudre d'oxyde d'aluminium contenant l'intégralité de l'aluminium, tout en dégageant une chaleur qui avoisine une dizaine de megajoules par kilogramme d'aluminium [61]. Une autre particularité de l'emploi de l'aluminium comme combustible est la présence d'une couche protectrice oxydée sur la poudre d'aluminium [85]. Cette enveloppe permet aux particules d'être inertes à température ambiante. [66].

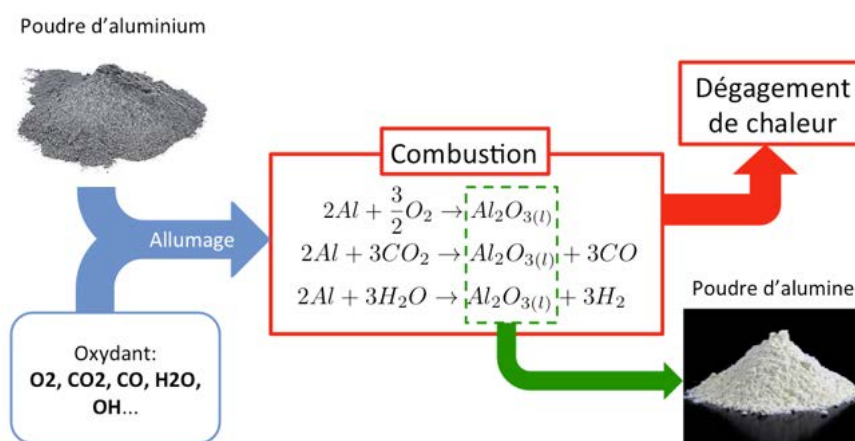


FIGURE 3 – Schématisation de la combustion de la poudre d'aluminium

Ces différentes propriétés intéressent divers domaines en fonction de leur application, tels que les domaines du spatial et de l'automobile. Pour le domaine du spatial, l'aluminium est initialement implanté dans le propergol solide des lanceurs (Fig. 4 (a)). La consommation du propergol libère progressivement les particules d'aluminium au sein de l'écoulement pour y brûler et chauffer davantage les produits de combustion [61]. Cet apport de chaleur permet d'expulser les gaz avec une plus grande vitesse et d'augmenter la poussée. Dans le domaine de l'automobile, des projets prévoient d'utiliser l'aluminium comme un combustible pour les moteurs [66]. L'emploi de l'aluminium dans ce domaine est plus orienté vers la diminution de l'émission des polluants, puisque la totalité de l'aluminium brûlé est récupérable sous la forme de poudre d'alumine. Cette poudre d'alumine pourrait être récupérée et traitée pour reformer de la poudre d'aluminium. Un cycle de traitement et de réutilisation de l'aluminium peut alors être envisagé dans les moteurs automobiles grâce à la combustion de ce métal (Fig. 4 (b)).

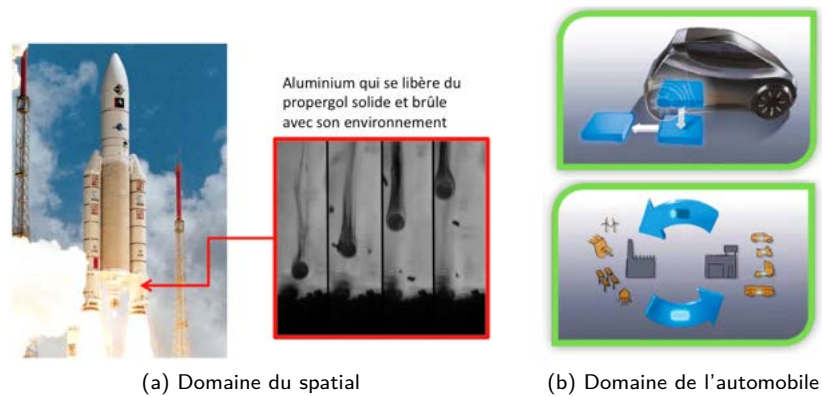


FIGURE 4 – Domaines exploitant la combustion de l'aluminium [61, 66]

... DANS LE DOMAINE DE LA DÉFENSE.

Un autre domaine porte un fort intérêt à l'utilisation de l'aluminium : celui de la défense. Tout comme le domaine du spatial, l'aluminium est perçu comme une source supplémentaire d'énergie qui peut être ajoutée dans les explosifs. En général, les explosions sont définies comme des phénomènes libérant de l'énergie dans l'espace plus rapidement qu'elle ne peut s'y répartir, entraînant alors la formation d'une onde de choc. L'un des exemples d'explosion est la détonation d'une charge explosive condensée. Elle est définie comme étant une onde de choc réactive qui se propage dans l'explosif solide et le décompose en produits de détonation gazeux tout en étant très exothermique. En fin de détonation, les produits sont en contact avec l'air et peuvent s'oxyder. Cette phase est la phase de post-combustion. Durant cette phase, on observe la croissance d'une boule de feu très lumineuse et hautement turbulente et la propagation d'ondes de choc [25]. C'est dans cette phase que l'aluminium ajouté initialement joue un rôle important [36, 35]. Les particules initialement chauffées par l'onde de détonation [32, 83], sont dispersées avec l'expansion des gaz et brûlent dans leur environnement. Elles libèrent alors de la chaleur au sein de la boule de feu, ce qui rend la boule de feu très lumineuse (Fig. 5) [24]. Malheureusement il est difficile de suivre l'évolution de ces particules d'aluminium lors de la post-combustion à cause des échelles de temps qui avoisinent quelques millisecondes et de l'intensité des phénomènes [36].

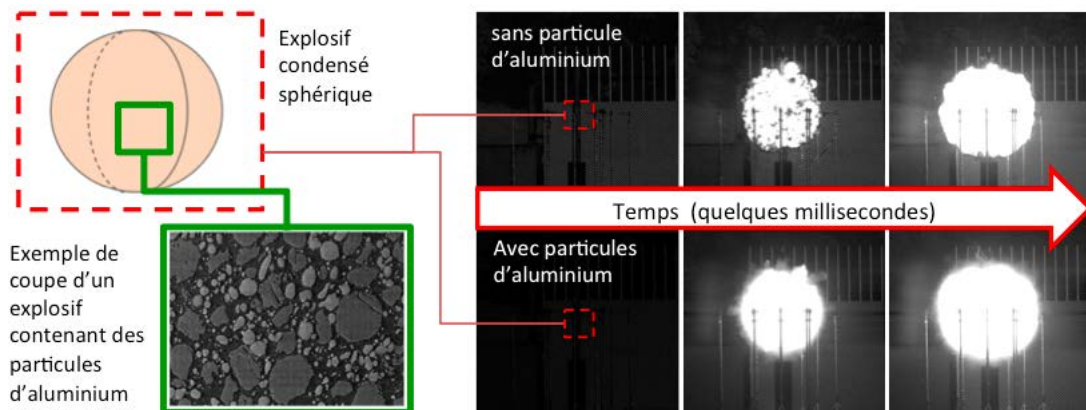


FIGURE 5 – Post-combustion d'un explosif. Les images proviennent de deux essais de détonation aérienne d'une charge sphérique sans particule d'aluminium (B2238A) et avec des particules d'aluminium (B2213A).

OBJECTIFS

1. POSITIONNEMENT DE LA THÈSE

Ces travaux de thèse ont été réalisés à l'Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT) et au centre CEA de Gramat. Ils sont financés par l'Agence Innovation et Défense (AID) et par la Région Occitanie. Cette thèse est essentiellement numérique et l'ensemble des simulations est réalisé avec le code de calcul AVBP [1] qui est développé par le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) avec l'aide de plusieurs partenaires académiques, tels que l'IMFT et le laboratoire Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion (EM2C) du Centre National de Recherche Scientifique (CNRS).

Cette thèse fait suite aux travaux de thèse de S. COURTIAUD [25] qui portaient sur la modélisation numérique de la post-combustion de charges explosives condensées et sur l'analyse des instabilités présentes à la périphérie de la boule de feu. Ses simulations de post-combustion ont été une véritable source d'information sur les phénomènes liés à la post-combustion de charges explosives, ce qui a conduit à s'interroger rapidement sur l'état des particules d'aluminium dans la post-combustion. Ce sujet de thèse a alors été mis en place pour implémenter la combustion de l'aluminium lors de la post-combustion. Néanmoins la modélisation de cette combustion est complexe et peu de cas d'études numériques sont présents dans la littérature. C'est pourquoi la thèse se divise en deux parties. La première est centrée sur la création et la validation d'un modèle de combustion diphasique de l'aluminium avec l'air. La seconde est une ouverture sur la modélisation de la post-combustion avec des particules inertes et réactives.

2. CONTRIBUTION SUR LA COMBUSTION DE L'ALUMINIUM

Cette contribution représente une grande partie de mes travaux, soit deux tiers des 3 ans de thèse. Son objectif est de mettre en place une modélisation de la combustion diphasique aluminium-air dans le code AVBP. Une étude bibliographique a été faite sur cette combustion dans le domaine expérimental et numérique. Dans le domaine expérimental, de nombreux cas ont été réalisés sur des flammes de type « bec Bunsen », « colonne » et avec des particules isolées. Au contraire, dans le domaine numérique, le nombre de cas d'étude est limité et les configurations diffèrent souvent les unes des autres. Un modèle numérique a alors été mis en place pour simuler la combustion de l'aluminium avec l'air dans une flamme laminaire avec une approche couplée Euler-Lagrange. Ce modèle prend en compte la formation de l'alumine et la suit en représentation lagrangienne derrière la flamme. Cette dernière particularité a pu être possible grâce à une méthode originale de germination de l'alumine et rend cette modélisation unique par rapport à celles qui sont disponibles dans la littérature. La mise en place de la combustion a pu être possible grâce à des bases de données provenant de la littérature comme le schéma réactionnel de L. CATOIRE [98], les propriétés thermodynamiques des espèces intervenant dans ce schéma et des modèles de changement de phase. Des simulations de combustion 0D et de flamme 1D aluminium-air ont été réalisées en faisant varier de nombreux paramètres (taille des particules d'aluminium, température de l'air, richesse et quantité de germes d'alumine) et les résultats obtenus sont très proches de la littérature en particulier pour la température et la vitesse de la flamme. Une flamme aluminium-air 2D a été mise en place avec une configuration proche des travaux expérimentaux de R. LOMBA [66], ce qui nous a permis de la comparer avec une flamme réelle.

3. CONTRIBUTION SUR LA POST-COMBUSTION

La contribution précédente ayant pris une part importante dans ma thèse, la contribution de l'aluminium durant la post-combustion représente un tiers des 3 ans de thèse. Une étude bibliographique complémentaire à celle établie dans les travaux de S. COURTIAUD [25] a été faite sur la participation énergétique de l'aluminium durant la post-combustion de charges explosives condensées. À partir de ces travaux et des simulations de post-combustion, deux principales études ont été menées. La première étude concerne la dispersion de particules d'aluminium inertes dans la boule de feu durant la post-combustion en faisant varier la distribution de taille des particules. Cette étude nous a permis d'avoir une idée de la position des particules au sein de la boule de feu et de leurs interactions physiques avec la boule de feu et les ondes de choc. La seconde étude a pour objet la participation énergétique de la combustion de l'aluminium sur la post-combustion. Cette étude nous a permis de mettre en avant l'influence de la combustion de l'aluminium grâce à l'accélération de l'onde de choc secondaire et à l'intensification de la post-combustion.

ORGANISATION DU MANUSCRIT

Le manuscrit de thèse est structuré en 3 parties.

La première partie regroupe 3 chapitres et développe les études bibliographiques et les méthodes de modélisation numérique intégrées à AVBP. Le premier chapitre de cette partie résume les travaux faits sur les flammes d'aluminium dans les domaines expérimental et numérique. De même, il met en avant les schémas réactionnels de combustion employés et les propriétés thermodynamiques des espèces intervenant dans ce schéma. Le deuxième chapitre de cette partie résume les travaux faits sur la post-combustion de charges explosives avec des particules d'aluminium dans les domaines expérimental et numérique, tout en définissant ce qu'est une détonation et la post-combustion. Le dernier chapitre de cette partie se concentre sur la définition des outils et des modèles numériques utilisés au cours de ces travaux de thèse dans le code AVBP.

La deuxième partie regroupe aussi 3 chapitres qui développent l'étude sur la combustion de l'aluminium et la validation du modèle de combustion diphasique mis en place. Le premier chapitre de cette partie présente les résultats du modèle obtenus lors de la simulation 0D de la combustion aluminium-air. Il permet d'évaluer les temps caractéristiques de cette combustion et de les comparer avec ceux extraits de la littérature. Le deuxième chapitre de cette partie présente les résultats des simulations de flammes 1D aluminium-air. Les études réalisées mesurent la température et la vitesse de flamme en fonction de nombreux paramètres comme la richesse, la taille des particules d'aluminium, la température de l'air et les caractéristiques des germes d'alumine utilisés pour leur condensation. Ces résultats sont comparés avec ceux extraits de la littérature. Le dernier chapitre de cette partie présente la flamme 2D aluminium-air qui a été modélisée selon la configuration expérimentale des travaux de thèse de R. LOMBA [66]. Il présentera l'initialisation de cette flamme et différentes mesures faites sur l'évolution des particules d'aluminium et la formation de l'alumine à travers les flammes. Des comparaisons seront faites entre la modélisation numérique de la flamme et les travaux expérimentaux sur la flamme aluminium-air.

La dernière partie regroupe 2 chapitres qui développent l'étude de la post-combustion d'une charge explosive avec des particules d'aluminium. Le premier chapitre de cette partie présente l'étude sur la dispersion de particules d'aluminium inertes durant la post-combustion. Il permet d'évaluer la dispersion des particules en fonction de leur taille et de leur inertie initiale dans la boule de feu. Le second chapitre de cette partie est une ouverture sur la participation énergétique de l'aluminium sur la post-combustion. À partir d'un modèle de combustion d'une particule isolée, l'influence de la combustion de l'aluminium sur l'évolution de la boule de feu et la propagation des ondes de choc sera évaluée.

Première partie

Mise en place de l'analyse

Chapitre 1

Notions pour la combustion de l'aluminium

La combustion de l'aluminium est une combustion diphasique puisqu'elle fait intervenir des réactions gazeuses entre l'aluminium gazeux, initialement sous forme liquide avant son évaporation, avec l'oxygène de l'air. Son analyse est rendue difficile par la rapidité du phénomène et la grandeur de l'énergie dégagée. Mais des études ont été menées sur les caractéristiques de la combustion et sur les modèles s'approchant au mieux de ce qui a été obtenu dans diverses expériences. Ce chapitre présentera un état de l'art sur un ensemble de cas expérimentaux et numériques qui étudient la combustion de l'aluminium, suivi d'un résumé des caractéristiques de la flamme telles que les durées de combustion, les températures et les vitesses de flamme. Après avoir défini la flamme aluminium-air, un développement sera fait sur les propriétés de l'aluminium et de ses oxydes trouvées dans la littérature et qui seront nécessaires pour la modélisation de la combustion.

1.1 Étude bibliographique

1.1.1 Les régimes de combustion

La combustion entre le combustible et l'oxydant peut prendre différentes formes selon les conditions d'entrée des réactifs. Pour le cas où les réactifs sont au sein d'une même phase, deux régimes de combustion peuvent intervenir : la flamme de pré-mélange ou la flamme de diffusion. La flamme de pré-mélange intervient lorsque le combustible et l'oxydant sont mélangés avant le front de flamme. La flamme de diffusion intervient lorsque le combustible et l'oxydant se situent de part et d'autre de la flamme.

La combustion diphasique admet deux régimes qui utilisent les flammes définies précédemment. Le choix de l'un ou de l'autre de ces régimes dépend de la dimension des particules. Pour des petites particules, la structure de la flamme est proche de celle d'une flamme de pré-mélange en Fig. 1.1. Cette flamme est considérée comme une flamme homogène. Les particules sont initialement dans le gaz contenant l'oxydant. À l'approche du front de flamme, les particules entrent dans la zone de pré-chauffage qui les chauffera et leurs permettra de changer de phase. Ainsi une particule solide passera de la phase solide à liquide pour ensuite s'évaporer en phase gazeuse. Pour des petites particules avec des faibles temps d'évaporation, les particules sont totalement évaporées avant le front de flamme et les gaz frais seront un mélange combustible-oxydant. Ce mélange réagira dans la zone de combustion et sera suivi de la zone des gaz brûlés. La composition des produits de combustion est établie à partir de la richesse Φ du mélange en considérant la combustion totale des particules de combustible. Cette richesse se calcule par rapport à la réaction globale de combustion où les débits massiques stœchiométriques du combustible $\dot{m}_{ptcl,st}$ et de l'oxydant $\dot{m}_{ox,st}$ à injecter sont définis. Ainsi la richesse est sous la forme : $\Phi = \frac{\dot{m}_{ptcl}/\dot{m}_{ox}}{\dot{m}_{ptcl,st}/\dot{m}_{ox,st}}$ avec \dot{m}_{ptcl} et \dot{m}_{ox} les débits massiques respectifs des particules et de l'oxydant. Ce calcul de la richesse pour le cas diphasique est identique à celle qui est réalisée pour le cas gazeux du fait que les particules s'évaporent avant la zone de combustion. Elle sera utilisée pour les cas où les particules ne s'évaporent pas entièrement avant le front de flamme.

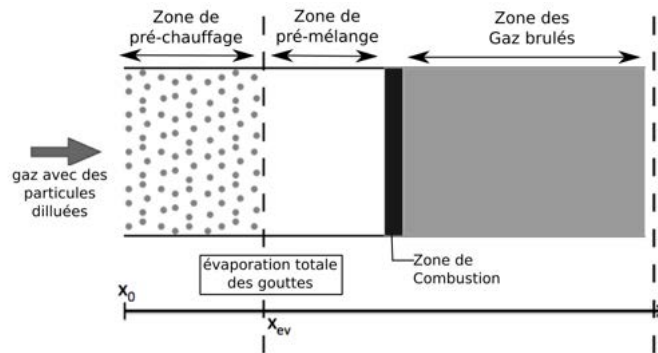


FIGURE 1.1 – Schéma d'une flamme diphasique homogène (figure extraite de [23])

Il existe un diamètre $d_{p, vap}$ qui est le diamètre limite pour lequel la particule n'a pas le temps de s'évaporer totalement avant le front de flamme. Pour un diamètre de particule $d_p > d_{p, vap}$, la combustion passe d'un régime homogène à un régime hétérogène avec la combustion des particules derrière le front de flamme. La Fig. 1.2 illustre l'effet de l'augmentation de la taille des particules et de la richesse sur le régime de la flamme. À partir du passage de la particule à travers le front de flamme, le comportement de la particule dépendra de la richesse Φ . Pour les flammes hétérogènes pauvres, pour lesquelles $\Phi < 1$ et $d_p > d_{p, vap}$, les particules continueront à brûler derrière la flamme en consommant la totalité des oxydants présents dans le gaz à partir d'une seconde flamme autour des particules. Cette seconde flamme s'éteindra lors de l'épuisement de la quantité d'oxydant et les particules continueront leur évaporation jusqu'à leur disparition complète dans les gaz brûlés. Pour les flammes hétérogènes riches, pour lesquelles $\Phi > 1$ et $d_p > d_{p, vap}$, les particules brûleront avec l'apparition d'une seconde flamme autour d'elles et s'évaporeront totalement sans s'éteindre derrière la flamme.

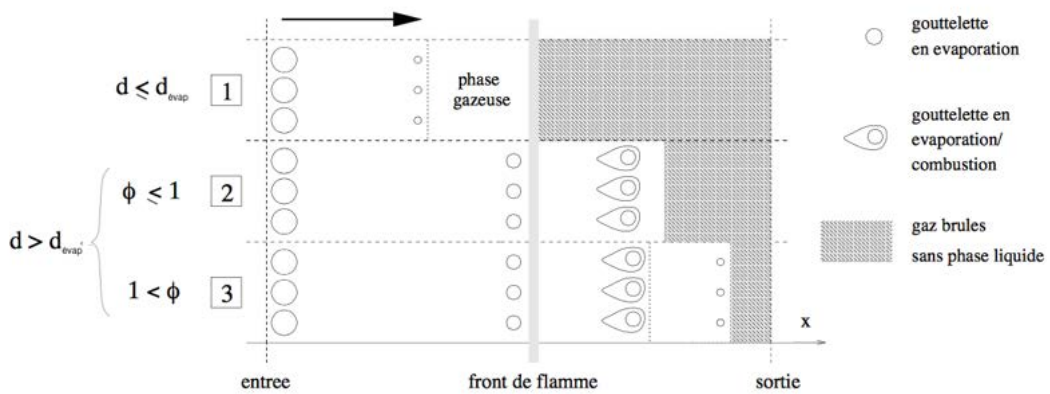


FIGURE 1.2 – Schéma sur l'influence de la taille des particules et de la richesse sur le régime de combustion (figure extraite de [65])

Pour les flammes hétérogènes, les particules situées derrière le front de flamme vont brûler à partir d'une flamme de diffusion entourant la particule. Ainsi la combustion se fera avec d'un côté les gaz de la particule qui s'évapore et de l'autre l'oxydant présent dans le milieu environnant. La température de l'environnement et la chaleur dégagée par la flamme entretiendront l'évaporation de la particule jusqu'à sa consommation complète.

1.1.2 Quelques cas expérimentaux

Depuis plusieurs dizaine d'années, la combustion de l'aluminium est un sujet qui intéresse de nombreux auteurs qui mettent en place des expériences pour l'étudier. Dans la littérature, l'ensemble des expériences peuvent se répartir sous plusieurs formes dont 3 d'entre elles sont plus souvent employées. Ces expériences sont sur l'étude des flammes de type « bec Bunsen », « colonne » ou de combustion d'une particule isolée. Cette section définira ces types d'expériences et la contribution de quelques auteurs. Les résultats des études seront données dans la partie 1.1.4.

1.1.2.1 Flamme de type « bec Bunsen »

Les flammes de type « bec Bunsen » sont régulièrement employées dans le milieu scientifique pour leur disposition expérimentale simple et leurs nombreuses variables d'entrée comme le débit d'air, le débit d'aluminium et le rayon du brûleur. Pour le cas de l'aluminium, le gaz de pré-mélange se compose d'un nuage de particules d'aluminium avec un environnement oxydant gazeux. La difficulté dans ces travaux est l'injection des particules, ou le génération de l'aérosol, qui doit donner un gaz de pré-mélange avec une concentration d'aluminium stable au cours du temps tout en correspondant à la richesse souhaitée. Le gaz de pré-mélange est acheminé au bec du brûleur et donnera une flamme conique. La Fig. 1.3 illustre un dispositif expérimental de flamme de type « bec Bunsen » où les particules d'aluminium sont injectées progressivement dans l'air ambiant par un piston en dessous du dispositif.

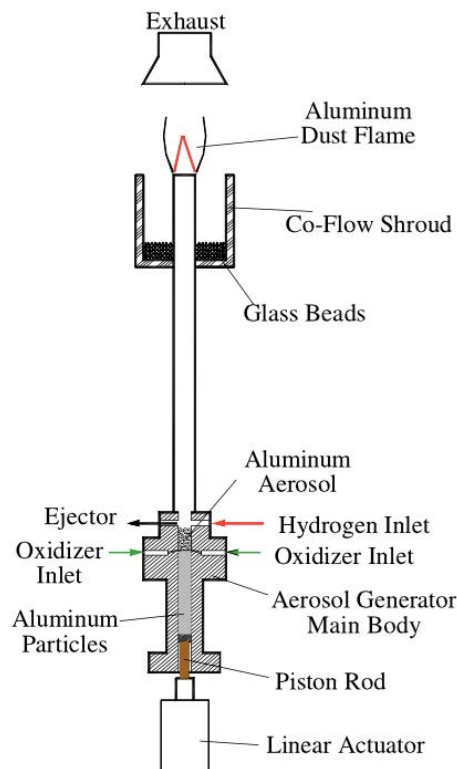


FIGURE 1.3 – Schéma d'un dispositif expérimental de flamme type "bec Bunsen" avec une génération d'une suspension de particules par piston (figure extraite de [52])

Cette flamme conique illustrée en Fig. 1.4 peut être étudiée avec différentes méthodes telles que la visualisation directe, la tomographie et la spectrophotométrie. Cette dernière se focalise sur l'émission du spectre de AIO. Cette espèce est un intermédiaire de réaction de combustion de l'aluminium avec l'air et elle est idéale

pour localiser la zone de réaction dans la flamme expérimentale. De même, l'amplitude de la raie spectrale permet de mesurer la température de la flamme. Ainsi, grâce à la position connue de la zone de réaction, il est possible de connaître la vitesse de la flamme et de la vérifier avec la tomographie.



FIGURE 1.4 – Image d'une flamme aluminium-air de type « bec Bunsen » (image extraite de [52])

De nombreux auteurs ont réalisé des travaux sur ce type de flamme et ont amélioré le générateur de suspension de poudre d'aluminium. Ces améliorations ont permis d'étoffer les résultats sur les propriétés de la flamme. Le tableau 1.1 référence quelques-uns de ces auteurs en précisant la taille des particules et l'objectif de l'étude.

TABLE 1.1 – Auteurs ayant réalisés des travaux sur les flammes aluminium-air de type « bec Bunsen »

Auteurs	Taille (μm)	Contribution
H. CASSEL <i>et al.</i> (1948) [19]	10-30	Produire une flamme stable Al-air avec brûleur type "bec Bunsen" Mesure de la vitesse de flamme pour les mélanges pauvres
S. GOROSHIN <i>et al.</i> (1996) [42]	6	Mise en place du générateur de particules par piston Mesure de la vitesse de flamme pour les mélanges riches
Y. SHOSHIN <i>et al.</i> (2004) [86]	11-20	Mise en place d'une flamme Al-air liftée Mesure de la vitesse de flamme pour les mélanges riches
G. RISHA <i>et al.</i> (2005) [84]	5-8 et 0,1	Effet du mélange de microparticules et de nanoparticules. Mesure de la vitesse de flamme et de la température
LOMBA <i>et al.</i> (2016) [66]	7-12	Mise en place du générateur de particules par tapis roulant. Mesure de la vitesse de flamme et de la température

1.1.2.2 Flamme de type « colonne »

La flamme de type « colonne » est un dispositif expérimental plus volumineux qui permet d'étendre l'étude à des pressions différentes pour voir son influence sur la flamme. La Fig.1.5 illustre le déroulement de l'expérience. Dans un premier temps, un nuage de poudre d'aluminium est mis en suspension dans le tube de façon homogène et stable par un jet d'air. Une étincelle est créée pour initialiser la flamme aluminium-air. Elle évoluera de façon sphérique jusqu'à être en contact avec les parois et se propagera selon l'axe du tube. La partie supérieure est fermée par un papier filtre permettant de bloquer le nuage dans le tube tout en permettant un équilibrage de la pression avec l'extérieur, mais il est rompu lors du passage de la flamme. Ainsi l'expérience est effectuée dans des conditions de pression constante.

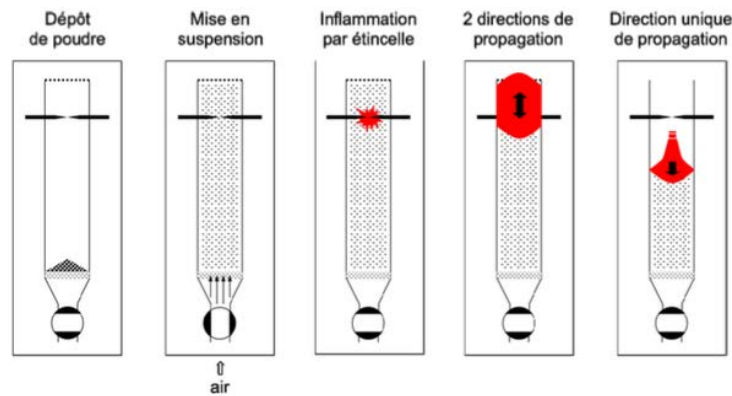


FIGURE 1.5 – Schéma du dispositif expérimental d'une flamme de type « colonne »(figure extraite de [33])

Plusieurs informations sur la flamme aluminium-air peuvent être extraites de cette expérience comme la température, la vitesse et la structure de la flamme en fonction de l'environnement et du nuage de particules. La Fig.1.6 est une succession d'images de la flamme au cours du temps qui permet d'extraire sa vitesse de propagation. Un autre avantage de cette méthode est l'analyse des produits de combustion dans le front de flamme. Ainsi il est possible d'étudier la composition du gaz brûlés par spectrophotométrie et de mesurer la taille des résidus d'alumine par visualisation directe.

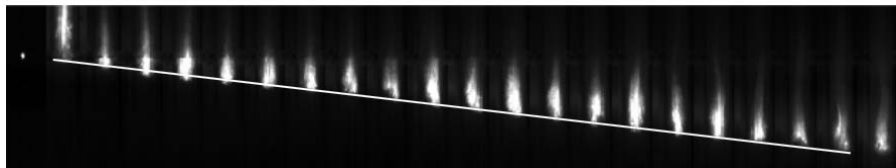


FIGURE 1.6 – Série complète d'images de la propagation du front de flamme lors de la combustion d'un nuage de nanoparticules (10 ms entre chaque images) (image extraite de [33])

Tout comme l'expérience des flammes de type « bec Bunsen », de nombreux auteurs ont employé cette méthode et ont apporté leur contribution dans l'analyse des flammes aluminium-air. Le tableau 1.2 référence quelques-uns de ces auteurs en précisant la tailles des particules et l'objectif de l'étude.

1.1.2.3 Combustion d'une particule isolée

Le dispositif expérimental permettant la combustion d'une particule isolée d'aluminium est plus complexe que les précédents cas expérimentaux présentés. Elle a été réalisée dans les travaux de thèse de V. SAROU-KANIAN [85]. Cette expérience a permis de mettre en évidence la phase d'allumage et la combustion d'une particule d'aluminium entourée par une flamme de diffusion. La Fig. 1.7 illustre le processus d'allumage et de combustion de l'aluminium. L'allumage va se produire lorsque l'aluminium gazeux va être en contact avec l'oxygène de l'air, c'est à dire dès l'instant où la goutte d'aluminium va s'évaporer ou lorsque la couche protectrice d'alumine va se rompre sous la pression de l'aluminium liquide. Ainsi une flamme de diffusion aluminium-air va se former autour de la particule qui va se réduire au fur et à mesure de son évaporation. En se réduisant, la surface d'échange va diminuer et limiter le débit d'aluminium évaporé. Cette diminution engendre un rapprochement de la flamme vers la surface de la goutte. Un autre phénomène conduira à la réduction de la surface d'échange : la condensation de l'alumine. La flamme de diffusion va produire de part et d'autre des produits de combustion, dont de l'alumine qui est stable uniquement sous forme liquide à cette température. L'alumine va se déposer sur l'aluminium, se rassembler en un lobe d'alumine pour grossir au cours du temps.

TABLE 1.2 – Auteurs ayant réalisés des travaux sur les flammes aluminium-air de type « colonne »

Auteurs	Taille (μm)	Contribution
ASLANOV <i>et al.</i> (1993) [4]	6	Étude du phénomène d'oscillations de la flamme dans le tube Mesure de la vitesse de flamme
YAGODNIKOV <i>et al.</i> (1995) [100]	25	Effet de la pression et de la concentration en oxygène Augmentation de la vitesse de flamme avec la pression Augmentation de la température avec la concentration en oxygène
CHEN <i>et al.</i> (2005) [21]	6	Propagation de flamme dans un tube horizontal Étude de plusieurs systèmes de dispersion de particules Effet de la turbulence liée à la dispersion des particules et de la paroi Augmentation de la vitesse de flamme avec la turbulence
ESCOT <i>et al.</i> (2007) [33]	6	Mesure de la vitesse de flamme Analyse des produits de combustion et résidus de particules

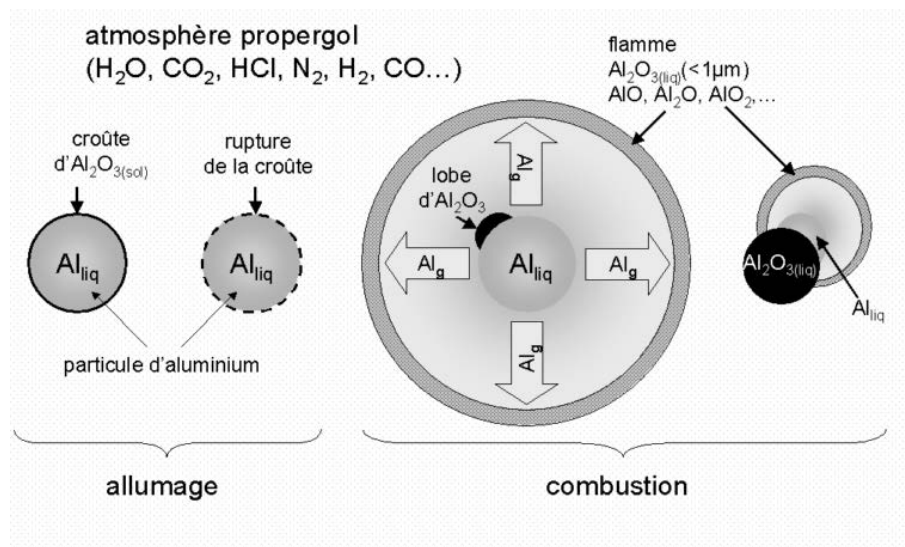


FIGURE 1.7 – Schéma du processus d'inflammation et de combustion d'une particule d'aluminium (figure extraite de [85])

La Fig.1.8 est une visualisation directe de la combustion d'une goutte liquide d'aluminium entourée d'une flamme détachée et accueillant un lobe d'alumine sur sa surface. L'allumage est réalisé avec un laser à CO₂ qui va chauffer la particule jusqu'à sa fusion et la rupture de la couche d'alumine. Cette particule est maintenue en suspension de façon aérodynamique avec un jet d'air. Grâce à ces travaux et aux autres auteurs présents dans le tableau 1.3, des temps caractéristiques d'allumage et de combustion des particules d'aluminium ont pu être référencés.

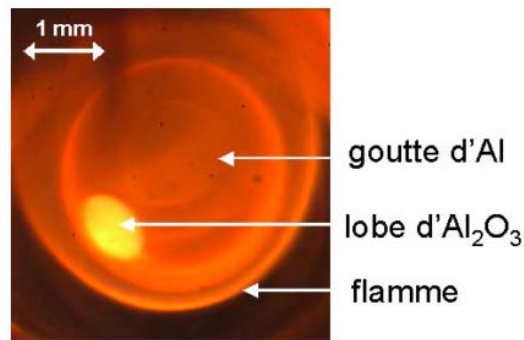


FIGURE 1.8 – Image d'une goutte d'aluminium en combustion (figure extraite de [85])

TABLE 1.3 – Auteurs ayant contribué à référencer les temps d'allumage et de combustion [12]

Auteurs	Taille (μm)	T_i (K)	P(atm)
OLSEN et BECKSTEAD <i>et al.</i> (1996) [73]	40-70	3000	1
WILSON et WILLIAMS <i>et al.</i> (1971) [99]	24-74	298	2-5
PRENTICE <i>et al.</i> (1974) [80]	240-400	298	1
HARTMAN <i>et al.</i> (1971) [47]	23-94	3000- 3189	25,5
PARR <i>et al.</i> (2003) [76]	0,01-10	2000	1

1.1.3 Quelques cas numériques

La combustion de l'aluminium est un phénomène complexe à modéliser numériquement à cause de la rapidité des réactions mises en jeu et de la condensation de l'alumine. Ainsi les travaux sur la modélisation numérique de ce phénomène sont moins présents dans la littérature que les cas expérimentaux. Cette section présentera 3 cas numériques employant des modèles pertinents et utilisables dans notre étude.

1.1.3.1 Particules d'aluminium dans les moteurs à propergols

Les travaux de L. LACASSAGNE [61] traitent la combustion des particules d'aluminium libérées lors de la combustion du propergol solide. La Fig.1.9 illustre la combustion des particules d'aluminium dans les produits de combustion du propergol solide. Ces particules, comme celles présentes dans le propergol d'Ariane 5, vont être relâchées dans l'écoulement et vont être en contact avec les produits de combustion. Elles passeront en phase liquide et seront injectées dans la chambre ou s'aggloméreront pour former une particule nettement plus grosse. Ensuite ces gouttes vont être à une température suffisamment haute pour s'évaporer et réagir avec l'oxygène présent dans l'écoulement. Une fois la combustion terminée, la particule se retrouve sous forme de résidus d'alumine qui seront entraînés dans l'écoulement et sortiront par la tuyère.

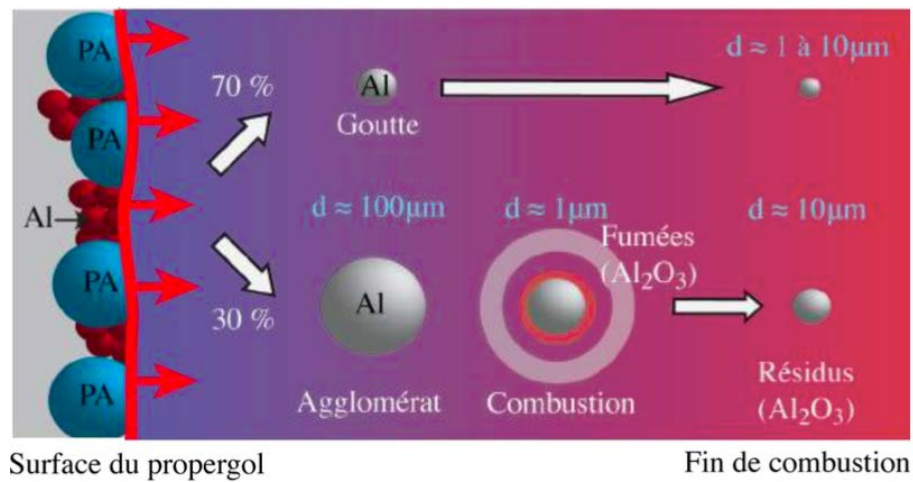


FIGURE 1.9 – Schéma de l'évolution d'une particule d'aluminium dans un moteur de fusée (figure extraite de [61, 38])

L'étude est menée numériquement avec AVBP, le code de CFD (Computation Fluid Dynamics) du CERFACS (Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique). La modélisation est Euler-Lagrange et l'analyse est faite sur l'influence de la combustion des particules d'aluminium dans l'écoulement au sein de la chambre. La modélisation de la combustion diphasique est simple et se dimensionne avec les temps caractéristiques. Dès que la particule est lâchée de la surface du propergol, elle s'évapore selon un modèle qui suit la loi du d^2 . Cette loi définit une durée d'évaporation d'une goutte qui est proportionnelle au diamètre initial de celle-ci au carré. Mais la particule ne produit pas d'aluminium gazeux et dégage de l'énergie qui correspond à la celle émise par la réaction de combustion de l'aluminium avec l'air (réaction globale de formation de l'alumine). Lorsque la particule arrive à un diamètre limite, qui est celui du résidu d'alumine, la particule d'aluminium brûle entièrement tout en gardant sa taille pour devenir le résidu d'alumine que l'on récupère en sortie de tuyère. La Fig.1.10 est un extrait d'une simulation où le rayon des particules se réduit jusqu'à atteindre la taille d'un résidu d'alumine. En se réduisant, les particules d'aluminium vont dégager de l'énergie et elles vont augmenter la température du gaz environnant avant d'interagir avec les instabilités présentes dans la chambre de combustion.

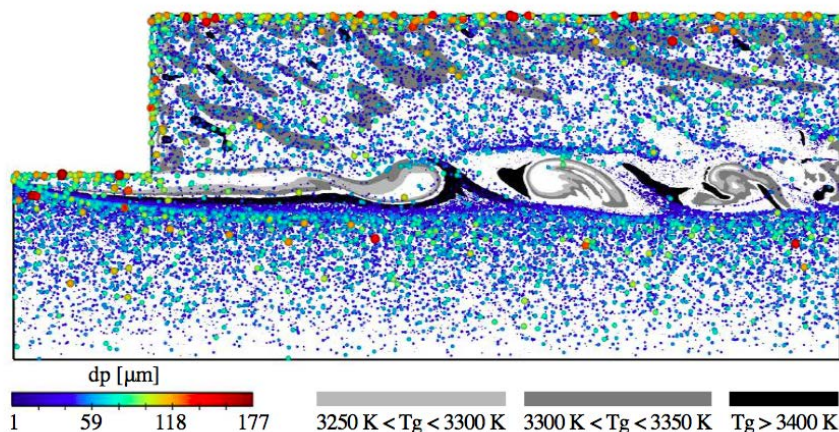


FIGURE 1.10 – Champ instantané sur la coupe en $z=0$ de particules colorées en fonction de leur diamètre et iso-volumes de la température du gaz colorés en niveau de gris (image extraite de [61])

Mis à part l'aspect intéressant de l'effet des particules sur les instabilités, cette modélisation de la combustion de l'aluminium est originale et n'intègre pas de schéma cinétique de combustion. Elle prend en compte la présence physique du résidu d'alumine avec un suivi sous forme lagrangien.

1.1.3.2 Flamme numérique de type « colonne »

Les travaux de D.H. HAN [46] sont faits sur la propagation des flammes dans les nuages de particules d'aluminium avec l'air, qui sont des études similaires aux travaux sur des flammes de type « colonne » de P. ESCOT [33]. Comme pour le cas numérique précédent, cette simulation suit les particules d'aluminium de façon lagrangienne et utilise un modèle d'évaporation. Mais une fois sous forme gazeuse, l'aluminium va réagir avec l'oxygène de l'air à partir d'un schéma réactionnel piloté par la loi cinétique d'ARRHENIUS. Les réactions sont tirées du modèle de combustion de l'aluminium de L. CATOIRE [98] qui seront précisées dans le chapitre 3. La Fig.1.11 est un extrait d'une simulation sur une coupe le long de l'axe de propagation de la flamme aluminium-air. Les particules vont s'évaporer à l'approche de la flamme et permettre aux réactions de combustion d'avoir lieu pour former massivement de l'alumine, puis d'autres oxydes d'aluminium de façon négligeable.

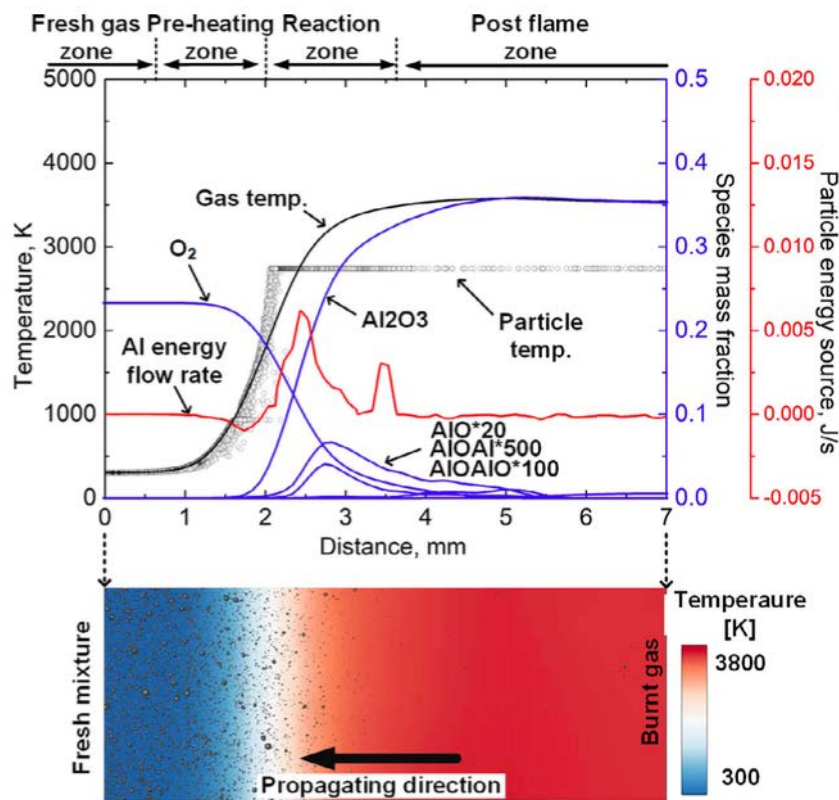


FIGURE 1.11 – Composition de la flamme dans les conditions stoechiométrique (figure extraite de [46])

Cette modélisation est intéressante sur plusieurs points, dont le suivi des particules d'aluminium de façon lagrangienne et l'utilisation d'un schéma cinétique de combustion. Ainsi, il permet de faire intervenir l'ensemble des oxydes d'aluminium dans la phase gazeuse dont l'alumine. Mais ce modèle ne prend pas en compte la condensation des gouttes d'alumine, ce qui l'empêche de suivre les particules d'alumine de façon lagrangienne en fin de combustion et les transferts thermiques qui lui sont associés.

1.1.3.3 Combustion numérique d'une particule isolée

Les travaux de J. GLORIAN [38] modélisent la combustion de l'aluminium à l'échelle de la particule. Dans ces conditions, la combustion en surface est prise en compte. Cette combustion met en jeu les réactions de combustion gazeuse mais aussi celles à la surface de la goutte. Ainsi le schéma réactionnel se divise en 2 groupes, l'un avec 49 réactions pour celles de surface et l'autre avec 51 réactions pour celles en phase gazeuse. Ces dernières réactions sont celles du schéma réactionnel de L. CATOIRE [98]. La Fig.1.12 présente plusieurs profils de température partant de la surface de la particule vers l'extérieur en fonction du milieu oxydant étudié. Avec les réactions de surface, la température monte rapidement lorsque l'on se rapproche de la particule et évolue selon l'environnement.

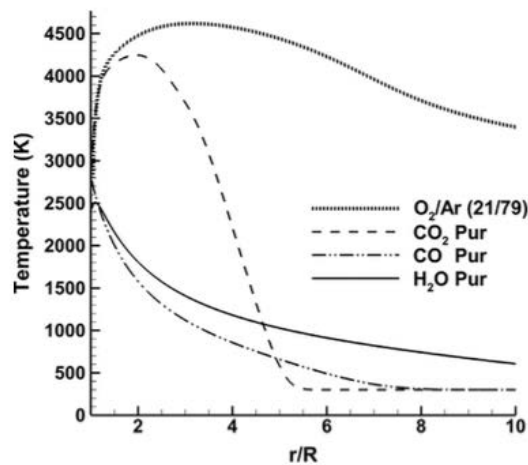


FIGURE 1.12 – Profil de température pour une particule de 0,2 mm de diamètre à 300 K et à 1 bar dans de l'air, du CO₂ pur, CO pur ou H₂O pur (figure extraite de [39])

À partir de ces simulations de combustion de surface, il a pu montrer l'importance de la combustion de surface sur l'ensemble de l'énergie dégagée par la particule sous certaines conditions de taille. L'auteur conclut que pour des particules de diamètre inférieur à 10 μm les réactions de surface représentent 30 % de l'oxydation totale de la particule. Ainsi pour les particules micrométriques, la cinétique en phase gazeuse est dominante pour la combustion de la particule mais ne l'est plus pour les nanoparticules qui suivent une cinétique de surface.

1.1.4 Analyse sur les propriétés des flammes d'aluminium

1.1.4.1 Durée et température d'allumage

La durée d'allumage d'une particule est la durée de chauffage d'une particule jusqu'à sa fusion complète. Pour la combustion d'une goutte de combustible comme l'éthanol, l'allumage a lieu dès le début de l'évaporation grâce à une petite source d'énergie qui peut être un simple milieu chaud ou une étincelle. Mais pour l'aluminium, le début de la combustion est plus compliqué et a été traité dans les travaux de V. SAROU-KANIAN *et al.* [85]. La particule solide d'aluminium est oxydée naturellement par l'air et présente une couche d'alumine autour d'elle. Cette couche a pour effet de retarder l'allumage de l'aluminium en l'empêchant de s'évaporer et d'entrer en combustion avec l'air. La Fig. 1.13 est un ensemble d'images qui retrace l'allumage d'une particule par un laser à CO₂. Dans un premier temps, la particule va être chauffée par le laser et va avoir une température dépassant la température de fusion de l'aluminium (image 1 sur la Fig. 1.13). La couche protectrice d'alumine va contenir l'aluminium fondu jusqu'à présenter une rupture (image 2 sur la Fig. 1.13). Cette rupture peut venir du dépassement de la température de fusion de l'alumine ou de la tension superficielle exercée par l'aluminium liquide sur la surface interne de la couche. Elle va entraîner la fusion progressive de

l'ensemble de la couche d'alumine (images 3 à 8 sur la Fig. 1.13). Ainsi l'apparition de l'aluminium en surface signe la fin de l'allumage et entraîne le rassemblement en lobes de l'alumine autour de la goutte d'aluminium (images 9 à 12 sur la Fig. 1.13).

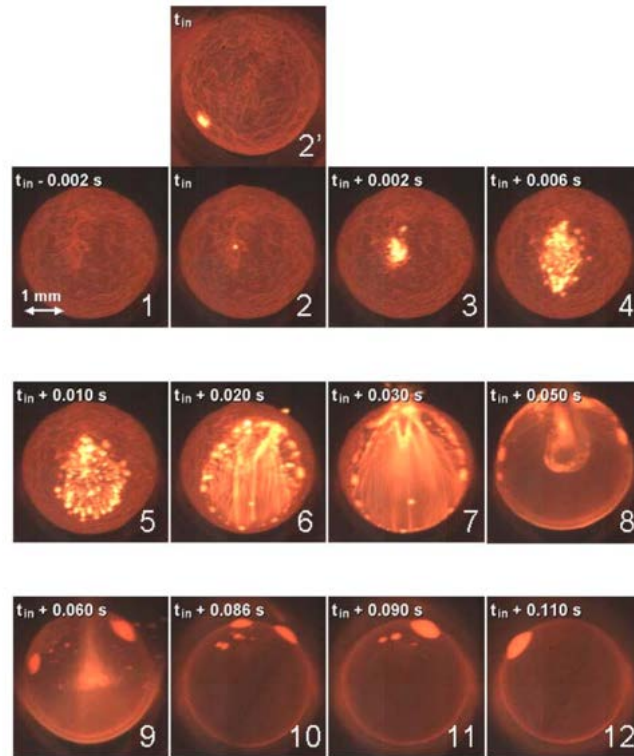


FIGURE 1.13 – Extrait chronologique d'images de l'allumage au laser CO_2 d'une particule d'aluminium dans l'eau gazeuse (image extraite de [85])

La couche d'alumine protectrice ne sera pas la même sur chacune des particules et dépendra de la méthode de fabrication de la poudre d'aluminium. Dans le cas général, l'épaisseur de la couche d'alumine a tendance à augmenter avec la taille des particules. La majorité des expériences présentes dans la littérature associent la température d'allumage à la température de fusion de l'alumine, soit 2350K. Pour des tailles de particules plus petites, la couche d'alumine va se réduire et la température d'allumage va se rapprocher de la température de fusion de l'aluminium qui est à 933K. Ainsi pour des diamètres de particules de 1 à 100 μm , la température d'allumage est dans l'intervalle de 1300K à 2300K d'après les travaux de M. A. TRUNOV *et al.* [93]. Les nanoparticules auront une température d'allumage qui sera celle de la fusion de l'aluminium d'après les travaux de T. P. PARR *et al.* [76]. De nombreux auteurs ont étudié la température d'allumage de l'aluminium en fonction du diamètre des particules et Y. HUANG *et al.* [52] les a récapitulés sur la Fig. 1.14. Ce graphique est composé en ordonnée de la température d'allumage et en abscisse du diamètre des particules, dont les résultats sont extraits de cas expérimentaux. Il montre que la température d'allumage évolue d'après ce qui a été expliqué précédemment. Pour des grosses particules de diamètre supérieur à 100 μm , la température d'allumage est égale à la température de fusion de l'alumine. Pour de plus petites particules, la température d'allumage se réduit de façon logarithmique avec le diamètre jusqu'à atteindre la température de fusion de l'aluminium pour des particules de diamètre proche de 10 nm.

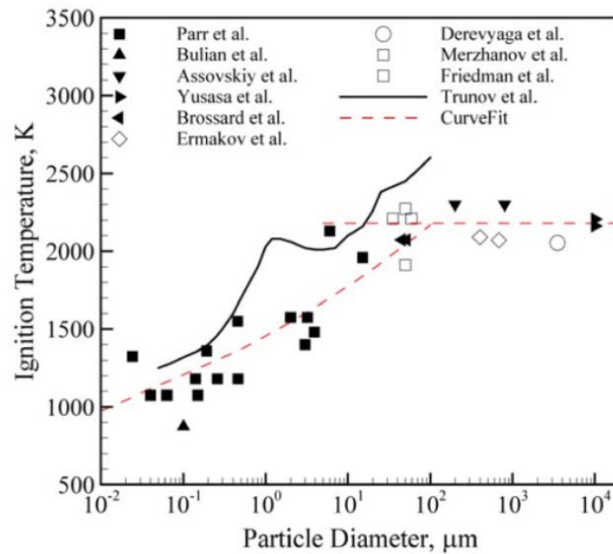


FIGURE 1.14 – Température d'allumage de l'aluminium en fonction du diamètre de la particule pour plusieurs conditions expérimentales (figure extraite de [52, 66])

1.1.4.2 Durée de combustion d'une particule

La durée de combustion est le critère le plus étudié concernant la combustion de l'aluminium. Elle définit le temps dont la particule a besoin pour se vaporiser entièrement à partir de la fin de son allumage. De nombreuses expériences ont permis de récupérer des durées de combustion dans divers environnements pour différentes tailles de particules micrométriques. Leurs résultats sont rassemblés dans un graphique sur la Fig. 1.15. Il est remarquable que le temps augmente avec le diamètre de la particule, ce qui est logique puisque plus la particule est volumineuse, plus le temps pour consommer la totalité de la masse d'aluminium est long.

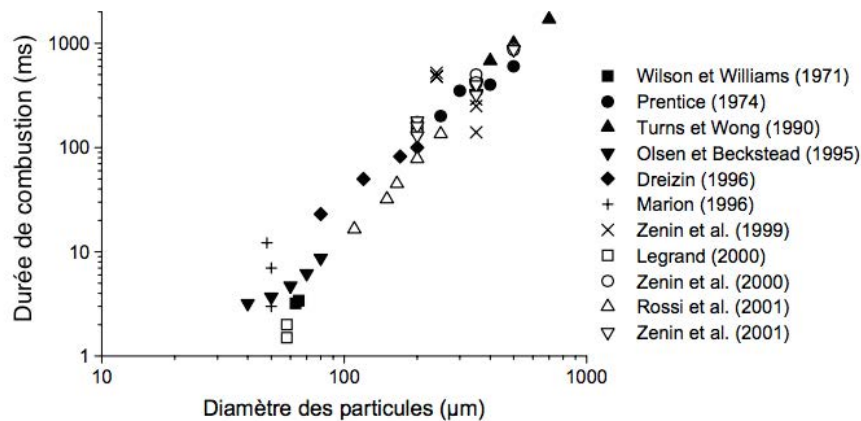


FIGURE 1.15 – Durée de combustion de l'aluminium dans l'air en fonction de la taille des particules d'aluminium (figure extraite de [85])

Ainsi des auteurs (comme WILSON & WILLIAMS, 1971 [99] ; OLSEN & BECKSTEAD, 1995 [73] ; DREIZIN, 1999 [30, 85]) ont assimilé cette évolution à la "loi en d^2 ", qui est la loi couramment utilisée pour définir la durée de combustion des gouttes d'hydrocarbure en fonction de leur diamètre. D'autres ont fait évoluer l'expression de la durée de combustion en créant une "loi en d^n ", où n est un facteur proche de 2 pour se rapprocher plus des points expérimentaux de la Fig. 1.15. Ensuite d'autres corrélations ont été proposées pour prendre en compte la composition de l'environnement, la température et la pression. Ainsi, l'étude a permis d'établir une expression complète de M. W. BECKSTEAD présentée en Éq. 1.1.4.2 [12] :

$$t_b = \frac{ad_p^n}{(X_{O_2} + 0,6X_{H_2O} + 0,22X_{CO_2})P^{0,1}T_0^{0,2}} \quad (1.1)$$

où $a = 0,0244$ pour $n = 1,5$ et $a = 0,00735$ pour $n = 1,8$, avec X_i la fraction molaire de l'oxydant i , T la température du milieu en Kelvin, d_p le diamètre de la particule en micromètre et t le temps en millisecondes. Mais cette expression reste peu utilisée par l'ensemble de la communauté. L'expression la plus utilisée Éq. 1.2 est celle formulée par K. P. BROOKS et M. W. BECKSTEAD en 1995 qui retourne sur une "loi en d^2 " tout en prenant en compte la composition du gaz environnant [17].

$$t_b = \frac{ad_p^2}{X_{O_2} + 0,533X_{H_2O} + 0,135X_{CO_2}} \quad (1.2)$$

Cependant ce modèle de durée de combustion reste uniquement valable pour les particules micrométriques. Les travaux de J. GLORIAN *et al.* [38] pour la partie numérique et les travaux de T. P. PARR *et al.* [76] pour la partie expérimentale, ont montré l'importance des réactions en surface pour les petites particules. Ainsi lorsque ces réactions interviennent, on passe d'une "loi en $d^{1.8}$ " à une "loi en $d^{0.3}$ ". Ce passage fait intervenir un autre facteur qui est la température de l'environnement. Pour le cas des particules micrométriques, la combustion est pilotée par la flamme aluminium-air qui est distante de la particule ce qui la rend indépendante de la température de l'environnement car l'évaporation est contrôlée par la température de vaporisation. Or pour les particules nanométriques, la flamme est proche de la surface liquide et elle accueille des réactions en surface qui sont dépendantes de la température de l'environnement. Un graphique présenté en Fig. 1.16, qui est présent dans les travaux de Y. HUANG *et al.* [51], récapitule les contributions de nombreux auteurs sur les temps de combustion en fonction du diamètres des particules. Ce graphique illustre la rupture de pente d'évolution du temps de combustion lors du passage entre les particules nanométriques et micrométriques. De même, il met en avant l'influence de la température de l'environnement sur le temps de combustion pour les particules nanométriques.

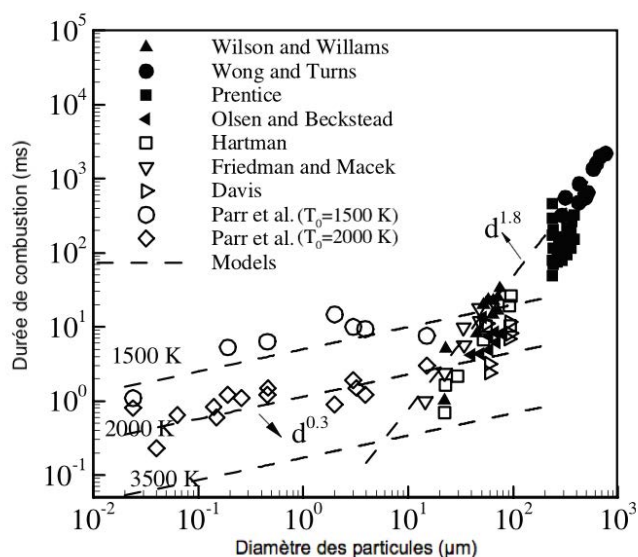


FIGURE 1.16 – Durée de combustion de l'aluminium en fonction du diamètre des particules pour des cas expérimentaux (figure extraite de [51])

1.1.4.3 Température de flamme

La température de flamme est la température locale maximale lors d'une expérience. Cette température a été relevée sur de nombreuses expériences dont quelques-unes sont présentées ci-après. Les travaux de S. GOROSHIN *et al.* [42] ont permis de mesurer la température de la flamme d'un brûleur de type « bec Bunsen » qui utilise des particules de 5,6 μm dans de l'air à pression ambiante et à la richesse $\Phi = 1,6$. À l'aide de la spectrométrie, il arrive à mesurer la température de la flamme à partir de l'analyse des raies spectrales d'AlO. La température obtenue est située aux alentours de 3250 K. Ensuite des expériences à haute pression avec des températures initiales plus hautes ont été réalisées par T. BAZYN *et al.* [11]. Ces mesures ont été faites dans un tube à choc dont la pression peut varier entre 4 et 32 bar et la température entre 1200 K et 2100 K. Ainsi une température maximale de flamme a été mesurée à 3500 K dans des conditions telles que la pression était de 32 bar, la température initiale de 2000 K et la fraction d'oxygène de 0,5. Une étude similaire à celle de S. GOROSHIN avait été faite par P. BUSER *et al.* [18], mais cette fois sur des particules plus grosses, avoisinant les 200 μm de diamètre dans des conditions ambiantes. Dans ces cas, la température de flamme était entre 2280 K et 3250 K.

Dans les travaux récents de R. LOMBA *et al.* [66] des mesures de température ont été faites sur des flammes d'aluminium dans les conditions ambiantes dont la richesse varie entre 0,7 et 1,4. Ces travaux traitent des flammes de poudre d'aluminium avec un diamètre moyen de 7 μm à partir d'un brûleur de type « bec Bunsen ». Tout comme S. GOROSHIN, il mesure la température de flamme à partir des pics de la raie spectrale de AlO dans le spectre émis par la zone de réaction. Les températures de flamme mesurées ne varient pas trop et se situent dans un intervalle entre 2966 K et 3326 K. Dans le même laboratoire, les travaux de P. ESCOT *et al.* [33] sur la propagation d'une flamme dans un nuage de particules d'aluminium avaient permis de mesurer la température de flamme pour des particules micrométriques et nanométriques avec la même méthode. Ces résultats ont montré que pour les particules nanométriques, la température de flamme avoisine les 2900 K alors qu'elle est de 3300 K pour les particules micrométriques. Cette évolution est en accord avec des réactions de combustion essentiellement gazeuses pour les particules micrométriques, où la flamme est détachée de la particule. Mais pour les particules nanométriques, la combustion est dominée par les réactions en surface et celles en phase gazeuse sont moins exothermiques.

1.1.4.4 Vitesse de flamme

La vitesse de flamme laminaire dans un nuage de particules d'aluminium peut être donnée par la théorie classique sur les flammes de prémélange dans le cas où la flamme est homogène. La flamme se compose alors de la zone de pré-chauffage et d'une zone de dégagement de chaleur, dont l'épaisseur δ_f dépend de la durée de combustion de la particule, t_b et de la conductivité du mélange, λ : $\delta_f \propto \sqrt{\lambda t_b}$. Dans ce cas, la vitesse de flamme laminaire S_L est telle que $S_L \sim \frac{\delta_f}{t_b} \sim \sqrt{\frac{\lambda}{t_b}}$. Mais cette description ne reste valable que pour les particules très petites pour lesquelles le chauffage est essentiellement dû à la conduction et non au rayonnement de la flamme sur l'aérosol. Pour les particules plus grandes, le raisonnement ne peut plus être celui qu'on peut avoir avec le cas des flammes de pré-mélange car les particules sont chauffées par le rayonnement provenant de la flamme et des particules avoisinantes.

Plusieurs auteurs ont réussi à réaliser des flammes laminaires auto-entretenues aluminium-air et ont mesuré des vitesses de flamme à partir de deux types d'expériences. L'une est le brûleur type « bec Bunsen » qui débite de l'air contenant des particules d'aluminium. L'autre est le tube dans lequel se propage une flamme aluminium-air au sein d'un nuage homogène de particules. La première flamme aluminium-air stabilisée a été obtenue par H. M. CASSEL *et al.* en 1948 et sa vitesse a été mesurée en 1964 [19]. Dans cette étude, deux types de particules d'aluminium ont été utilisées, des particules atomisées de diamètre $d_p < 10 \mu\text{m}$ et des grandes particules de $d_p < 30 \mu\text{m}$. Pour le premier cas, des vitesses de 20 à 25 cm/s ont été mesurées pour une richesse de 0,4, avec une augmentation à 40 cm/s pour une richesse de 0,8. Pour le second cas, les vitesses de flamme ont diminué pour atteindre 12 à 24 cm/s pour les mêmes richesses. Dans le même cadre, il met en évidence l'effet de la proportion de l'oxygène dans le gaz et démontre que la vitesse de flamme est proportionnelle à $\sqrt{X_{O_2}}$ et augmente lorsque la fraction d'oxygène augmente de 21 % à 100 % pour un mélange O_2-N_2 .

Ensuite d'autres auteurs sont intervenus pour améliorer l'étude des flammes d'aluminium en utilisant des nouvelles technologies pour analyser la vitesse de la flamme et en développant de nouvelles méthodes pour mesurer la dimension des particules introduites. Y. L. SHOSHIN et E. L. DREIZIN *et al.* [86] ont mis en place une flamme liftée¹ d'aluminium avec un contrôle de la concentration de poudre d'aluminium injectée par un champ électrostatique. Cette méthode permet d'injecter des particules avec une distribution moins large et d'éviter d'injecter des agglomérats de particules. Pour deux tailles moyennes de particules, 11 μm et 20 μm , la vitesse de flamme est de 40 cm/s et 27 cm/s respectivement. Ces vitesses varient peu en fonction de la concentration qui allait de 400 à 800 g/m³, qui était la plage où la flamme était stabilisée. G. A. RISHA *et al.* [84] ont mesuré l'effet de l'impact du mélange d'une poudre micrométrique et nanométrique sur la vitesse de flamme dans l'air atmosphérique avec un brûleur de type « bec Bunsen ». Il avait un lot de particules micrométriques de diamètre compris entre 5 et 8 μm et un lot de particules nanométriques de 100 nm. Il a employé aussi un système de dispersion de particules qui lui empêchait de former des agglomérats de particules d'aluminium à la sortie du « bec Bunsen ». Pour le lot micrométrique, la vitesse de flamme était dans les environs de 14 cm/s pour des richesses de 0,8 à 1,4. Mais pour une augmentation de la concentration d'aluminium du lot de particules nanométriques dans le lot de particules micrométriques, la vitesse de flamme augmente. Pour une concentration de 30 % en masse de nano-particules, la vitesse de flamme a été mesurée à 34 cm/s. Y. HUANG *et al.* [52] ont repris en 2007 cette expérience pour développer un modèle mathématique permettant de prévoir la vitesse de propagation de la flamme et la température de flamme pour des distributions de tailles de particules bimodales. Dernièrement, R. LOMBA [66] a étudié les flammes d'aluminium et de magnésium via un brûleur type « bec Bunsen » dans le cadre de sa thèse. À partir d'une tomographie laser et d'une visualisation directe, il a analysé la structure de la flamme et la vitesse de celle-ci en fonction de diverses richesses dans les conditions ambiantes. Ainsi la vitesse de flamme avoisinait 27 cm/s pour une richesse allant de 0,7 à 1,4. Pour son étude, P. ESCOT [33] a mesuré la propagation de la flamme d'aluminium dans un tube. Il a mesuré la vitesse de flamme pour deux types de particules, des particules micrométriques ($d_p = 4,8 \mu\text{m}$) et nanométriques ($d_p = 187 \text{ nm}$) dans des conditions riches. Les nuages de particules ont été obtenus par un pulse d'air sous les particules initialement déposées sur une plaque poreuse. Les vitesses de flamme obtenues respectivement dans ces conditions sont 29 cm/s et 32 cm/s. La Fig. 1.17 regroupe une partie des mesures de vitesse de flamme des différents auteurs cités précédemment. Ce graphique, avec en ordonnée la vitesse de

1. Flamme détachée du nez du brûleur.

flamme et en abscisse la concentration d'aluminium, montre que la vitesse de flamme n'est pas fixe selon la concentration d'aluminium et dépend d'un autre paramètre. Ce paramètre est essentiellement la distribution de taille de particules dans la poudre d'aluminium utilisée.

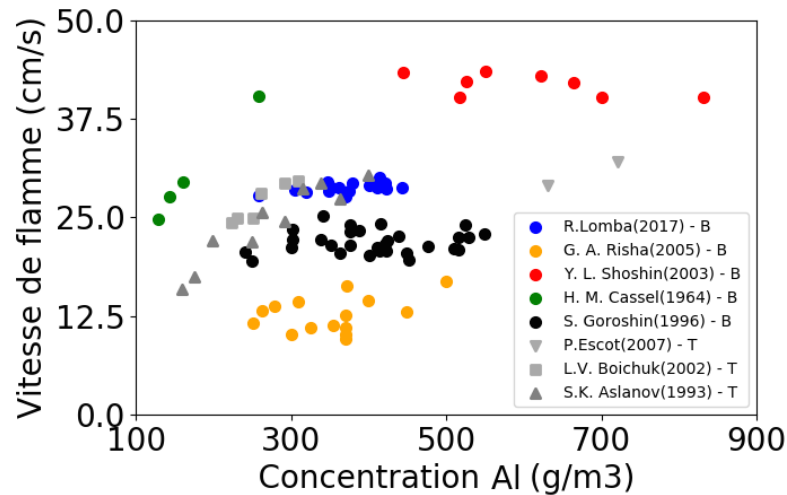


FIGURE 1.17 – Vitesse de flamme Al-air observée avec des expériences de type « bec Bunsen » (B) et de tube (T) (figure réalisée à partir de [66])

1.1.4.5 Résidus de combustion

Dans l'ensemble des travaux qui utilisent de l'aluminium comme combustible, on retrouve constamment des résidus dans les produits de combustion, dont principalement de l'alumine. D'après les travaux de Y. KWON [60], l'alumine n'est pas le seul résidu qui peut être formé à basse température. Les produits de combustion peuvent contenir Al_2O_3 , Al_2O et AlN , mais l'alumine reste le seul résidu pour les hautes températures.

Lors de la combustion de la particule d'aluminium, l'alumine va se former. D'après les travaux de V. V. KARASEV *et al.* [54], la taille des gouttes d'alumine qui se forment à partir d'une goutte d'aluminium, dont le diamètre est compris entre 4 et 350 μm , est de l'ordre de 5 et 150 nm de diamètre. Mais si le nombre de gouttes d'alumine est important, cela entraîne des agglomérats d'alumine qui peuvent conduire à la formation de gouttes dont le diamètre avoisine quelques centaines de micromètres. Comme le montrent les travaux de O. G. GLOTOV *et al.* [40], la taille des résidus est dépendante des paramètres initiaux comme la pression ou la température, mais dépend peu de la taille des particules d'aluminium. La combustion de particules de petites tailles forment, en grand nombre, de petits résidus d'alumine. Or cette forte quantité de nanoparticules conduit à une agglomération de celles-ci pour former de grosses particules d'alumine, mais en plus petit nombre. Ce résultat est proche de celui que l'on peut constater pour la combustion des grosses particules d'aluminium.

1.2 Propriétés physiques et thermodynamiques

Après avoir mis en évidence les propriétés des flammes aluminium-air à travers diverses expériences et simulations, il est nécessaire d'étudier les propriétés des espèces intervenant dans la combustion de l'aluminium. Cette section résume l'ensemble des propriétés physiques et thermodynamiques des espèces qui seront introduites dans les simulations de combustion diphasique d'aluminium avec AVBP.

1.2.1 Aluminium

1.2.1.1 Aluminium solide

L'aluminium est sous forme solide dans les conditions ambiantes et sa masse volumique est de $2701,5 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ [95]. Ce métal est un excellent conducteur de chaleur avec une conductivité thermique $\lambda = 237 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ à 298 K [95], soit 66 % de celle du cuivre.

Comme tous les métaux, le point de fusion de l'aluminium dépend de sa pureté et de la pression. Pour l'aluminium considéré, son point de fusion est de 933 K avec une enthalpie de fusion $\Delta H_{\text{fusion,Al}} = 397 \text{ J}\cdot\text{g}^{-1}$ [95] pour une pression de 1 bar. L'augmentation de la pression va avoir tendance à augmenter la température de fusion. Cette évolution est indiquée dans le tableau 1.4.

TABLE 1.4 – Point de fusion de l'aluminium solide pur en fonction de la pression.

Pression (MPa)	Point de fusion (K)
0,1	932
500	963
1 000	993
2 000	1 053
3 000	1 103
4 000	1 153

1.2.1.2 Aluminium liquide

Après le franchissement du point de fusion, l'aluminium se retrouve en phase liquide en subissant une augmentation de volume de 6,26 % [95]. Du fait de cette dilatation, la masse volumique décroît avec la température comme cela est illustré dans le tableau 1.5.

TABLE 1.5 – Masse volumique de l'aluminium liquide en fonction de la température pour une pression de 1 bar

Température (K)	Masse Volumique ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)
933	2 368
973	2 357
1 023	2 345
1 073	2 332
1 123	2 319
1 173	2 304

Le changement d'état va réduire la conductivité thermique qui va passer à une valeur comprise entre 110 et $115 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. La phase liquide est caractérisée par d'autres paramètres tels que la tension superficielle et la viscosité. La première a été mesurée par M. LEITHNER par lévitation électromagnétique de l'aluminium liquide. Ses résultats sont présentés en figure 1.18 et sont comparés avec ceux d'autres auteurs utilisant la même méthode de mesure [64]. Ainsi pour une température de 1200 K, l'aluminium liquide a une tension superficielle de $840 \text{ mN}\cdot\text{m}^{-1}$.

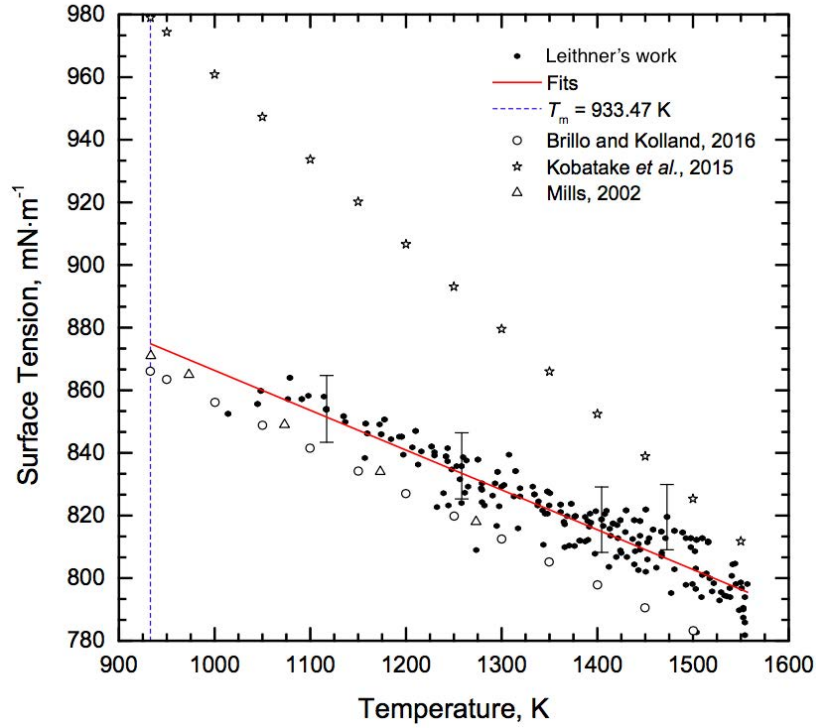


FIGURE 1.18 – Mesures expérimentales de la tension superficielle de l'aluminium liquide en fonction de la température (figure extraite de [64])

La viscosité est plus compliquée à déterminer et de nombreux auteurs utilisent l'Éq. 1.3 recommandée par M. J. ASSAEL *et al.* [5] :

$$\log\left(\frac{\mu}{\mu^0}\right) = a + \frac{b}{T} \quad (1.3)$$

avec $a = -0,7324$ et $b = 803,49$ K d'où $933 \leq T(K) \leq 1270$ et $\mu^0 = 1$ mPa·s.

Pour de fortes valeurs de température et de pression, l'aluminium liquide peut atteindre son point d'évaporation qui est estimé à partir de la relation de Clausius-Clapeyron (Éq. 1.4). Celle-ci donne la pression de vapeur saturante en fonction de la température. Les valeurs de référence employées sont celles des mesures de R. E. HONIG et D. A. KRAMER [50], avec $P_{ref} = 1$ bar et $T_{ref} = 2793$ K.

$$\ln(P_{vap}) = \ln(P_{ref}) - \frac{M_{Al}\Delta H_{vap,Al}}{R}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}}\right) \quad (1.4)$$

La chaleur latente $\Delta H_{vap,Al}$ peut être estimée à partir de sa définition (Éq. 1.5) et d'une valeur de référence, soit $\Delta H_{vap,Al,ref} = 10,76$ kJ·g⁻¹ à $T_{ref} = 2767$ K [95].

$$\Delta H_{vap,Al} = \Delta H_{vap,Al,ref} + (C_{Pl} - C_{Pg})(T - T_{ref}) \quad (1.5)$$

TABLE 1.6 – Tableau des coefficients du polynôme CHEMKIN pour l'aluminium sous forme gazeuse (données présentes en annexe A)

Température	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇
300K ≤ T < 600K	2,7368	-5,9123e ⁻⁴	-4,0339e ⁻⁷	2,3223e ⁻⁹	-1,7055e ⁻¹²	3,8867e ⁺⁴	4.3638
600K ≤ T ≤ 5000K	2,5596	-1,0632e ⁻⁴	7,2023e ⁻⁸	-2,1211e ⁻¹¹	2,2894e ⁻¹⁵	3,8902e ⁺⁴	5,2345

1.2.1.3 Aluminium gazeux

Les propriétés thermodynamiques de l'aluminium sous forme gazeuse sont définies à partir du polynôme CHEMKIN (1.6), (1.7) et (1.8) [71]. Ce polynôme permet l'obtention de la capacité calorifique C_P , de l'enthalpie H et de l'entropie S du gaz en prélevant les coefficients du tableau 1.6. D'autres formes polynomiales existent avec plus de coefficients comme celle de NASA ou de GRIMECH.

$$\frac{C_P}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (1.6)$$

$$\frac{H}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \quad (1.7)$$

$$\frac{S}{R} = a_1 \ln T + a_2 T + \frac{a_3}{2} T^2 + \frac{a_4}{3} T^3 + \frac{a_5}{4} T^4 + a_7 \quad (1.8)$$

La viscosité du gaz d'aluminium peut être définie à partir d'une loi de puissance Éq. 1.9.

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (1.9)$$

Ainsi la viscosité est définie en fonction de la température selon une référence qui est celle calculée à partir de l'approche théorique de CHAPMAN-ENSKOG [43]. Elle permet de calculer les données de transport pour les gaz mono-atomiques et non polarisés, tels que le gaz d'aluminium. L'Éq 1.10 estime la viscosité en utilisant la masse molaire M , le paramètre σ_{int} de longueur dans le potentiel d'interaction en unité Å=0.1nm et l'intégrale réduite de collision $\Omega^{(2,2)*}$ qui dépend de $T^* = \frac{k_B T}{\varepsilon}$.

$$\mu = A \frac{\sqrt{MT}}{\sigma_{int}^2 \Omega^{(2,2)*}} \quad (1.10)$$

avec $A=2,6693 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2 \cdot \text{Pa} \cdot \text{s} \cdot \text{mol}^{-1/2} \cdot \text{K}^{-1/2} \cdot \text{kg}^{-1/2}$.

Pour l'aluminium gazeux, et bien d'autres espèces gazeuses, les coefficients σ et ε sont donnés dans les études de la NASA [89]. Ainsi pour cette espèce, les coefficients sont $\sigma_{Al} = 2,655 \text{ Å}$ et $\varepsilon/k_B = 2750 \text{ K}$.

1.2.2 Combustion de l'aluminium

Les schémas réactionnels qui décrivent la combustion de l'aluminium ont pris de nombreuses formes au fil des études. Dans les études de M. T. SWIHART [90] et P. ESCOT [33], un schéma cinétique de l'aluminium a été élaboré pour décrire sa combustion. Ce schéma fait intervenir 33 espèces et 89 réactions (Annexe B). Mais un mécanisme chimique détaillé est trop complexe pour être interfacé avec un code d'hydrodynamique du fait d'un pas de temps considérablement faible et du nombre de cellules à calculer à chaque pas de temps, ce qui oblige à employer des simplifications adaptées à une condition thermodynamique particulière. Ainsi un schéma cinétique réduit donné dans le tableau 1.7, de 8 espèces et 9 réactions, a été mis en place et utilisé par Y. HUANG [52] et W.M. BECKSTEAD [12] pour l'interaction avec O₂, puis deux autres schémas ont été développés dans les tableaux 1.8 et 1.9. Ils ont été écrits et utilisés dans les travaux de L. Catoire et de O. ORLANDI [74] pour prendre en compte d'autres environnements comme des milieux contenant les espèces OH, H₂O, CO et CO₂.

TABLE 1.7 – Mécanisme détaillé, hors formation d'alumine, de la réaction Al/air en phase gazeuse (tableau extrait de [38])

N°	Réactions
1	$\text{Al} + \text{O}_2 = \text{AlO} + \text{O}$
2	$\text{Al} + \text{O} + \text{M} = \text{AlO} + \text{M}$
2bis	$\text{AlO} = \text{Al} + \text{O}$
3	$\text{AlO} + \text{O}_2 = \text{AlO}_2 + \text{O}$
4	$\text{AlO}_2 = \text{AlO} + \text{O}$
5	$\text{Al}_2\text{O} = \text{Al} + \text{AlO}$
6	$\text{Al}_2\text{O}_2 = \text{AlO}_2 + \text{Al}$
7	$\text{Al}_2\text{O}_2 = 2 \text{AlO}$
8	$\text{Al}_2\text{O}_2 = \text{Al}_2\text{O} + \text{O}$
9	$\text{O}_2 + \text{M} = 2\text{O} + \text{M}$

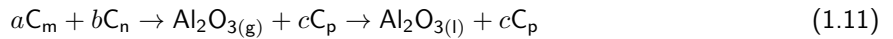
TABLE 1.8 – Mécanisme réduit de la réaction Al/CO₂ (tableau extrait de [38])

N°	Réactions
10	$\text{Al} + \text{CO}_2 = \text{AlO} + \text{CO}$
11	$\text{AlO} + \text{CO}_2 = \text{AlO}_2 + \text{CO}$
12	$\text{CO}_2 = \text{CO} + \text{O}$
12bis	$\text{CO}_2 + \text{M} = \text{CO} + \text{O} + \text{M}$
13	$\text{CO} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{O}$
14	$\text{Al}_2\text{O} + 2 \text{CO}_2 \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3 + 2\text{CO}$
15	$2\text{AlO} + \text{CO}_2 = \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{CO}$

TABLE 1.9 – Mécanisme réduit de la réaction Al/H₂O (tableau extrait de [38])

N°	Réactions
16	$\text{Al} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlO} + \text{H}_2$
17	$\text{Al}_2\text{O} + 2 \text{H}_2\text{O} = \text{Al}_2\text{O}_3 + 2\text{H}_2$
18	$2 \text{AlO} + \text{H}_2\text{O} = \text{Al}_2\text{O}_3 + \text{H}_2$
19	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$
20	$\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$

Le tableau 1.7 ne contient pas la formation de l'alumine liquide car cette dernière suit une approche spécifique proposée par L. CATOIRE [98]. Le schéma de formation de l'alumine (1.11) se découpe en deux phases dont la première est la réaction sous forme gazeuse et la suivante une réaction de condensation de l'alumine. Ainsi en séparant ces étapes, L. CATOIRE prend en compte la part importante d'énergie libérée lors de la formation de l'alumine liquide.



Avec :

$C_m = AlO, Al_2O, AlO_2$

$C_n = H_2O, O_2$

$C_p = H_2, O_2$

1.2.3 Oxydes d'aluminium

1.2.3.1 Alumine

La formation de l'alumine sous forme gazeuse et sa condensation lors de la combustion de l'aluminium est l'étape la plus exothermique. La phase liquide de l'alumine est connue dans la littérature avec des expériences basées sur la lévitation aérodynamique. Ainsi de nombreuses données sur ses propriétés sont présentées dans le tableau 1.10 [27].

TABLE 1.10 – Propriétés de l'alumine liquide (tableau construit à partir de [27])

Paramètre	Valeur
Masse molaire	102 g·mol ⁻¹
Masse volumique	3000 kg·m ⁻³ à T= 2320 K
Température de fusion	2350 K à P=1 bar
Température d'évaporation	3800 K à P=1 bar
Tension superficielle	0,43 N·m ⁻¹ à P=1 bar
Chaleur spécifique	1418,86 J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
Enthalpie de formation	-1620 kJ/mol

Malgré la dispersion des résultats expérimentaux concernant sa viscosité, une fonction a été établie pour suivre son évolution. Ainsi la viscosité dynamique de la particule suit la formule donnée en Éq. 1.12

$$\mu = AT \exp \frac{B}{T} \quad (1.12)$$

avec $A=6,8 \cdot 10^{-8}$ Pa·s·K⁻¹ et $B=13200$ K.

Si les propriétés de l'alumine liquide sont caractérisées, il n'en est pas de même pour celles de la phase gazeuse. Cette dernière est très difficile à caractériser à cause de ses conditions extrêmes d'existence. De nombreux auteurs précisent que cet état n'existe pas en justifiant d'une décomposition en phase gazeuse. D'autres stipulent que cet état existe en prenant l'exemple de l'expérience de S. R. DESAI *et al.* [26] dans un plasma composé d'atomes d'aluminium et d'oxygène. Ainsi très peu de données sont disponibles concernant les propriétés de l'alumine sous forme gazeuse. Mais il est possible de récupérer des coefficients polynomiaux (en Fig. 1.11) sous la forme CHEMKIN dans la base de donnée de L. CATOIRE *et al.* [98] et l'enthalpie standard de formation de l'alumine gazeuse $\Delta H_{f, Al_2O_3} = -567,907$ kJ·mol⁻¹. Ce polynôme permet, comme pour l'aluminium, d'obtenir la capacité calorifique, l'enthalpie et l'entropie de l'alumine gazeux en fonction de la température.

TABLE 1.11 – Tableau des coefficients du polynôme CHEMKIN pour l'alumine sous la forme gazeuse (données présentes en annexe A)

Température	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇
200K ≤ T < 1000K	5,63	2,44.10 ⁻²	-3,40.10 ⁻⁵	2,32.10 ⁻⁸	-6,28.10 ⁻¹²	-6,83.10 ⁴	1,47.10 ⁻²
1000K ≤ T ≤ 5000K	1,19.10 ¹	1,72.10 ⁻³	-6,77.10 ⁻⁷	1,16.10 ⁻¹⁰	-7,21.10 ⁻¹⁵	-6,97.10 ⁴	-3,06.10 ¹

1.2.3.2 Autres oxydes d'aluminium

D'autres espèces gazeuses interviennent dans la combustion de l'aluminium tels que AlO, AlO₂, Al₂O, Al₂O₂ et O. Ces espèces sous forme gazeuse sont connues dans la littérature. Ainsi toutes les propriétés thermodynamiques sont disponibles dans les tables CHEMKIN et dans les études de NIST² à partir de leurs coefficients polynomiaux illustrés dans le tableau. 1.12.

TABLE 1.12 – Tableau des coefficients du polynôme CHEMKIN pour les autres oxydes d'aluminium sous la forme gazeuse (données présentes en annexe A)

Température	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇
AlO							
200K ≤ T < 1000K	3,35	7,31.10 ⁻⁵	7,100.10 ⁻⁶	-1,06.10 ⁻⁸	4,70.10 ⁻¹²	7,05.10 ³	6,97
1000K ≤ T ≤ 6000K	2,88	1,96.10 ⁻³	-3,86.10 ⁻⁷	7,31.10 ⁻¹²	2,48.10 ⁻¹⁵	7,28.10 ³	9,56
AlO₂							
200K ≤ T < 1000K	4,34	8,65.10 ⁻³	-8,91.10 ⁻⁶	3,13.10 ⁻⁹	9,49.10 ⁻¹⁴	-6,26.10 ³	5,44
1000K ≤ T ≤ 6000K	6,83	7,33.10 ⁻⁴	-3,14.10 ⁻⁷	5,97.10 ⁻¹¹	-3,91.10 ⁻¹⁵	-6,86.10 ³	7,06
Al₂O							
200K ≤ T < 1000K	4,07	1,13.10 ⁻²	-1,67.10 ⁻⁵	1,20.10 ⁻⁸	-3,44.10 ⁻¹²	-1,95.10 ⁴	4,51
1000K ≤ T ≤ 6000K	6,83	6,85.10 ⁻⁴	-2,69.10 ⁻⁷	4,61.10 ⁻¹¹	-2,88.10 ⁻¹⁵	-2,01.10 ⁴	-9,02
Al₂O₂							
200K ≤ T < 1000K	4,84	1,67.10 ⁻²	-2,23.10 ⁻⁵	1,48.10 ⁻⁸	-3,96.10 ⁻¹²	-5,05.10 ⁴	2,97
1000K ≤ T ≤ 6000K	9,14	1,38.10 ⁻³	-5,42.10 ⁻⁷	9,26.10 ⁻¹¹	-5,75.10 ⁻¹⁵	-5,15.10 ⁴	-18,46

2. National Institute of Standards and Technology

1.3 Conclusion sur la combustion de l'aluminium avec l'air

La combustion diphasique de l'aluminium est complexe à cause de ses régimes de combustion, de son allumage et de la formation de l'alumine. Ces régimes de combustion des flammes aluminium-air sont proches de ce qui peut être observé pour des simples gouttes de combustible couramment utilisées. Mais la taille des particules joue un rôle important dans le cas de l'aluminium. Si la particule est trop grosse (pour une taille de plusieurs dizaine de micromètres), la particule n'aura pas le temps pour s'évaporer totalement dans le front de flamme et elle continuera à brûler dans les produits de combustion. Si la particule est petite (de l'ordre du micromètre), elle s'évaporerait totalement dans le front de flamme et on retrouverait une flamme aluminium-air homogène. Mais si la particule est trop petite (de l'ordre du nanomètre), des réactions de surface auront lieu et domineront la combustion.

Ces régimes de combustion ont été étudiés dans la littérature avec des expériences de plusieurs types. Ces expériences de type « bec Bunsen », « colonne » ou de combustion de particule isolée ont permis de récupérer des mesures de vitesse de flamme, de température de flamme et des observations directes de structure de flamme. Les mesures de température de flamme ont montré que la variation de la richesse et de la distribution de la taille des particules de la poudre n'avaient que peu d'effet sur celle-ci et elle avoisinait les 3300 K. À l'opposé la vitesse de flamme est dépendante de la richesse, mais elle est très sensible à la poudre utilisée pouvant la faire passer de $12 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ à $38 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. Pour des particules micrométriques, la combustion est dirigée par l'évaporation contrairement aux cas avec des nanoparticules, ainsi pour la même richesse, la réduction de la taille des particules aura tendance à accélérer la flamme. De même l'augmentation de la richesse va accélérer la flamme.

L'élément qui rend la combustion de l'aluminium unique est la formation de l'alumine liquide dans ses gaz brûlés. Ce phénomène va influencer la combustion par la présence d'une phase dispersée dans les produits de combustion et par l'énergie libérée par la condensation de l'alumine. Cette espèce va aussi influencer l'allumage de l'aluminium à cause de la couche protectrice en alumine présente initialement sur la particule solide. Elle va retarder l'allumage en contenant l'aluminium et en l'empêchant d'être en contact avec l'environnement gazeux. L'allumage aura lieu lorsque la couche sera rompue. La gestion de l'alumine sous forme particulaire est un élément peu présent dans les modélisations numériques de combustion de l'aluminium dans la littérature. Or il existe tout de même des cas numériques de flammes aluminium-air où les mesures de vitesse de flamme et de température sont proches des cas expérimentaux.

La modélisation de la combustion entre l'aluminium et l'air a été étudiée par quelques auteurs. À partir de leurs travaux, des données sur les propriétés massiques, de transport et thermodynamique sur l'aluminium et ses oxydes ont été récupérées. De même, des données ont pu être trouvées sur les propriétés de changement de phase de l'aluminium et de l'alumine. Pour cette dernière, les propriétés la concernant sont beaucoup moins présentes dans la littérature et un travail de recherche plus poussé a été fait.

À partir de tous ces éléments, il sera possible de modéliser une flamme aluminium-air qui suivra de façon lagrangienne les particules d'aluminium et d'alumine. Le schéma réactionnel sera celui qui est couramment utilisé dans l'ensemble des cas numériques, modèle dérivée de celui de L. CATOIRE. Dans les chapitres 4 et 5, la modélisation sera inspirée des travaux de D. H. HAN et comparera ses durées de combustion avec ceux présents dans la littérature. Dans le chapitre 6, une analyse plus poussée sera faite sur la représentation numérique de la flamme aluminium-air de type « bec Bunsen » obtenue dans les travaux R. LOMBA qui nous servira comme référence et nous permettra de valider la modélisation mise en place. En parallèle, le modèle de combustion de L. LACASSAGNE sera récupéré grâce aux échanges faits avec le CERFACS car il ne prend pas en compte de schéma réactionnel et modélise la particule d'alumine en fin de combustion. Ce modèle sera employé pour la post-combustion de charge explosive et comparé à celui mis en place dans le chapitre 8.

Chapitre 2

Notions sur la post-combustion des charges explosives

Ce second chapitre présente le contexte physique de la post-combustion d'une charge explosive contenant des particules d'aluminium. Des sujets liés à cette thématique sont abordés comme la détonation d'un explosif contenant de l'aluminium, la post-combustion et l'effet de l'aluminium sur ces dernières.

2.1 De l'explosif à la post-combustion

2.1.1 Explosifs

2.1.1.1 Définition

Une substance explosive est une substance au sein de laquelle peuvent se propager des réactions de décomposition de façon autonome. Deux régimes de combustion existent : la déflagration et la détonation. Si la déflagration correspond à une transformation *quasi* isobare se propageant à vitesse subsonique dans le milieu réactionnel, la détonation est, quant à elle, une onde de choc réactive se déplaçant à vitesse supersonique par rapport à l'explosif non-réagi. Elle se traduit donc, contrairement à la déflagration, par une augmentation significative de la pression. Les produits de réaction sont accélérés en sens inverse de la propagation du front dans le cas d'une déflagration et dans le même sens que celui de propagation dans le cas d'une détonation. Il est à noter qu'un explosif peut être solide, comme le TNT, liquide, comme le nitrométhane, ou sous forme d'un mélange gazeux, comme le mélange hydrogène/oxygène. Notre champ d'investigation est ici l'explosif condensé exclusivement qui est généralement sous oxygéné.

2.1.1.2 Types d'explosifs

Il est possible de distinguer deux types d'explosifs : les explosifs homogènes et les explosifs hétérogènes. À la différence des premiers, les seconds comportent plusieurs phases ce qui se traduit par une structure microscopique granulaire comme cela est illustré en Fig. 2.1. Un faible nombre d'explosifs est homogène, comme le TNT. Ainsi la plupart sont composés d'un mélange de cristaux d'explosifs et peuvent aussi contenir des liants inertes, comme dans le cas du V401 (liant polymère).

En plus de la matière explosive et de l'éventuel liant, il est possible d'ajouter des particules métalliques qui auront une influence dès la détonation de la charge. Cette composition énergétique est qualifiée d'explosif hétérogène métallisé. L'un des métaux couramment utilisés est l'aluminium, on parle alors d'explosif aluminisé. L'intérêt de l'additif métallique réside dans le fait qu'il peut réagir avec les produits de combustion et l'air de façon très exothermique ce qui permet d'augmenter significativement l'énergie dégagée. Une illustration d'un explosif aluminisé est donnée en Fig. 2.2.

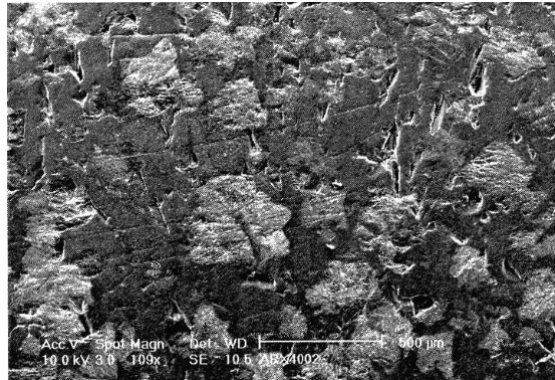


FIGURE 2.1 – Coupe d'un explosif TNT-ONTA vue au microscope : on distingue les grains d'explosifs (ONTA ^a) au milieu du liant actif (TNT ^b) (image extraite de [25])

-
- a. 3-oxynitrotriazole
 - b. trinitrotoluène

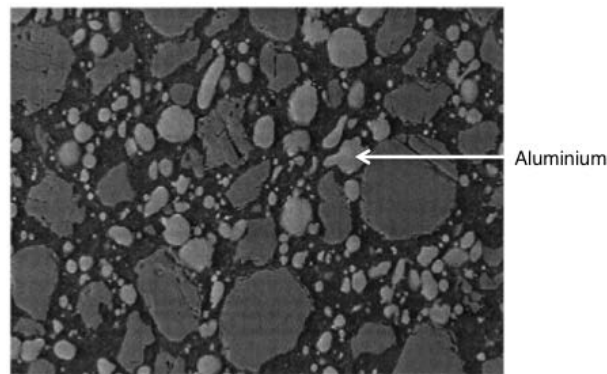


FIGURE 2.2 – Coupe d'un explosif hétérogène métallisé (RDX ^a-PA ^b-PBHT ^c-Al) (image extraite de [25])

-
- a. hexogène
 - b. perchlorate d'ammonium
 - c. polybutadiène hydroxytéléchélique

2.1.1.3 Répartition de l'aluminium au sein de l'explosif

La poudre d'aluminium est répartie de façon homogène dans l'ensemble de l'explosif. Les particules peuvent être sous forme sphérique dite de « paillette » ou sous une forme plate et allongée dite de « flocon ». La différence entre ces deux formes est une surface d'exposition plus importante pour la seconde forme. La Fig. 2.2 illustre une coupe d'un explosif aluminisé où on constate que l'aluminium est sous la forme de paillettes. La dimension de ces particules n'est pas constante et va varier selon une loi de distribution donnée.

Une loi de distribution couramment appliquée à la granulométrie est la loi de distribution log-normale qui est obtenue à partir de la loi de distribution normale [28]. La densité de probabilité, donnée en Éq. 2.1 dépend de l'écart-type géométrique σ_G , du diamètre moyen géométrique des particules d_G et du diamètre de la particule étudiée d_p .

$$f = \frac{1}{\sigma_G \sqrt{2\pi} d_p} \exp\left(-\frac{((\ln(d_p) - \ln(d_G))^2)}{2(\ln(\sigma_G))^2}\right) \quad (2.1)$$

TABLE 2.1 – Exemple de caractéristiques d'une charge sphérique de B2213A

Paramètre	Valeur	unité
ρ_{charge}	1591,3	kg/m ³
ρ_{Al}	2700	kg/m ³
composition(B2238A–Al)	77 :23	-
R_{charge}	24,7	mm
d_G	30	μm
d_{32}	50	μm

L'écart type géométrique σ_G est le paramètre qui permet de définir la largeur de la densité de distribution et elle peut être calculée à partir de relations approchées établies par T. ALLEN *et al.* [3] telles que :

$$\ln(d_{32}) = \ln(d_G) + 2,5(\ln(\sigma_G))^2 \quad (2.2)$$

Le paramètre d_{32} est le diamètre de SAUTER qui correspond au diamètre moyen pondéré par la surface des particules. Cette valeur est couramment fournie pour l'analyse de la granulométrie de l'aluminium dans les explosifs condensés. Il se calcule selon l'Éq. 2.3 qui utilise le nombre de particules n_i de diamètre $d_{p,i}$ présent dans un volume donné V .

$$d_{32} = \frac{\sum n_i d_{p,i}^3}{\sum n_i d_{p,i}^2} = \frac{\sum m_i}{\sum m_i/d_i} \quad (2.3)$$

Ainsi il est possible de définir la distribution des tailles des particules dans un explosif condensé comme le montre l'exemple suivant. Le tableau 2.1 résume les propriétés de l'explosif B2213A qui peut être considérée comme un dérivé de l'explosif B2238A (mélange de RDX-PBHT) avec un ajout de 300 g d'aluminium par un kilogramme de ce dernier et la Fig. 2.3 représente la distribution des particules pour ce cas avec le nombre de particules en ordonnée et le diamètre des particules en abscisse.

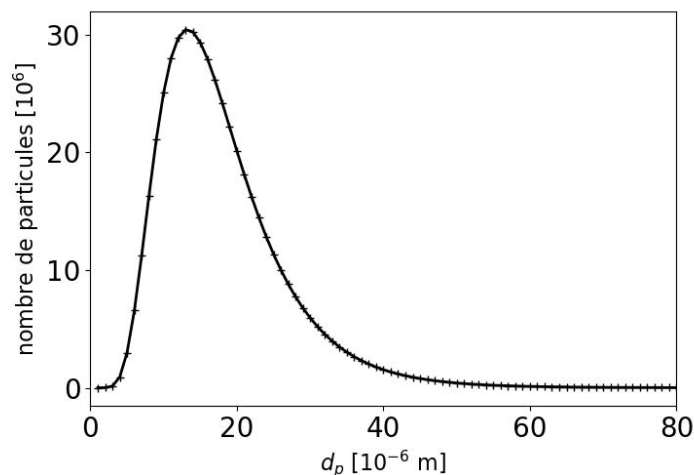


FIGURE 2.3 – Distribution du diamètre des particules d'aluminium dans la B2213A

2.1.2 Détonation

La détonation est une onde de choc réactive fortement exothermique se déplaçant de façon supersonique par rapport au milieu amont. Pour les phases condensées, la détonation s'accompagne d'un changement de phase vers l'état gazeux dans un délai très court et peut générer des particules solides de carbone. On atteint la fin de la détonation après un temps de quelques microsecondes à une centaine de microsecondes, selon la géométrie de l'explosif et une vitesse de détonation étant généralement comprise entre 6500 et 9500 m·s⁻¹. La température et la pression atteignent alors respectivement plusieurs milliers de kelvins et la centaine de kilobars.

Le phénomène de détonation a été décrit dans un premier temps par CHAPMAN en 1899 et JOUGUET en 1906, puis par ZELDOVITCH, VON NEUMANN et DÖRING dans la période 1940-1943 [10]. Ces théories sont mono-dimensionnelles. La fin de la détonation représente les premiers instants de la phase post-combustion.

2.1.2.1 Modélisation de l'onde de détonation

La théorie CHAPMAN-JOUGUET offre un modèle d'onde de détonation idéale permettant de passer instantanément de l'explosif en phase condensée à un gaz composé de produits de détonation. Le front d'onde est assimilé à une discontinuité physique et chimique se propageant à une vitesse D_{CJ} au sein de l'explosif. Les hypothèses liées à ce modèle sont un front d'onde plan, un écoulement aval laminaire, des réactions chimiques instantanées et un fluide en équilibre thermodynamique et chimique en aval du front. Ainsi l'épaisseur de la zone de réaction est considérée comme nulle. Dans le cas d'une détonation, la condition CJ correspond à la production maximale d'entropie induisant une solution stable en fin de réaction. Cet état, nommé détonation CJ, est défini comme le seul cas où il y a un unique point d'intersection entre la droite de RAYLEIGH Eq. 2.4 et l'adiabatique de CRUSSARD Éq. 2.5, aussi appelée adiabatique de détonation de la courbe d'HUGONIOT. La première traduit la conservation de la masse et de la quantité de mouvement et la deuxième traduit la conservation de l'énergie :

$$P_1 = P_0 - (\rho_0 D)^2 (\nu_1 - \nu_0) \quad (2.4)$$

$$P_1 = 2 \frac{e_1 - e_0 - Q}{\nu_1 - \nu_0} - P_0 \quad (2.5)$$

à l'état i , e_i l'énergie interne massique, ν_i le volume massique et ρ_i la masse volumique, puis Q l'énergie dégagée par la réaction et D la vitesse de détonation. Ainsi le front de détonation est sonique par rapport au choc d'où la formule (Éq. 2.6) ci-dessous.

$$u_1 - D_{CJ} = -c_1 \quad (2.6)$$

Il est alors possible, à partir de la conservation de la masse à travers l'onde de détonation, d'établir la relation (Éq. 2.7) dans cet état stable, où c_{CJ} est la vitesse du son immédiatement en aval de l'onde.

$$\rho_{CJ} c_{CJ} = \rho_0 D_{CJ} \quad (2.7)$$

Ainsi en partant de l'hypothèse $P_0/P_{CJ} \ll 1$, en utilisant γ_{CJ} qui est le coefficient polytropique des gaz de détonation et en utilisant les équations précédentes, nous pouvons caractériser l'onde de détonation idéale en fonction de D_{CJ} . On obtient alors :

$$u_{CJ} = \frac{D_{CJ}}{\gamma_{CJ} + 1}, \quad (2.8)$$

$$c_{CJ} = \frac{\gamma_{CJ} D_{CJ}}{\gamma_{CJ} + 1}, \quad (2.9)$$

$$P_{CJ} = \frac{\rho_{CJ} D_{CJ}^2}{\gamma_{CJ} + 1}, \quad (2.10)$$

$$\frac{\nu_{CJ}}{\nu_0} = \frac{\gamma_{CJ}}{\gamma_{CJ} + 1}. \quad (2.11)$$

Ce modèle, nous permet d'obtenir des résultats en accord avec les données expérimentales dans les cas stationnaires malgré les hypothèses fortes.

Le modèle ZND développé indépendamment par Y.B. ZELDOVICH, J. VON NEUMANN et W.DÖRING se rapproche mieux du phénomène physique. Contrairement au modèle précédent, celui-ci considère un choc inerte suivi d'une zone de réaction exothermique d'épaisseur finie, au cours de laquelle la matière se détend de manière adiabatique jusqu'à l'état CJ, le tout se déplaçant en régime permanent dans le milieu explosif. On illustre la comparaison des 2 modèles sur la Fig. 2.4.

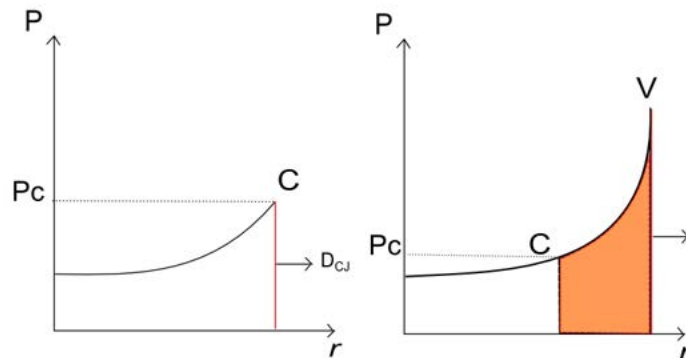


FIGURE 2.4 – Modélisation de l'onde de détonation. À gauche : modèle CJ ; À droite : modèle ZND.

L'état en fin de réaction reste le même que celui obtenu avec le modèle CJ du fait de la stabilité de l'onde de détonation. Mais le fait de prendre en compte la structure de l'onde de détonation va mettre en évidence une surpression nommée pic de Von Neumann au choc, noté V, qui est définie par le point de tangence entre la courbe d'HUGONIOT (Éq. 2.12) et la droite de RAYLEIGH (Éq. 2.4).

$$P_1 = 2 \frac{e_1 - e_0}{\nu_0 - \nu_1} - P_0 \quad (2.12)$$

2.1.2.2 Onde de détonation dans un explosif sphérique

Les modèles présentés partent d'une analyse mono-dimensionnelle qui utilise des hypothèses aboutissant à une vitesse constante tout au long de l'explosif. Cependant la vitesse de détonation dépend de plusieurs paramètres, dont le rayon de courbure en fonction duquel elle varie de façon monotone et croissante.

Dans nos cas d'étude, l'explosion aérienne est celle d'un explosif de forme sphérique dont l'amorçage sera réalisé au centre. Ainsi après l'amorçage, l'onde de détonation va partir du centre de l'explosif pour se propager vers l'extérieur sous forme sphérique. En parcourant l'explosif, le rayon de courbure de l'onde va augmenter et conduire à une augmentation de la vitesse de l'onde jusqu'à la bordure de l'explosif. Cette propagation est illustrée par la Fig. 2.5. La dynamique des gaz induite par le passage de l'onde va induire un état des produits de détonation chauds non homogènes à l'intérieur de la boule de feu. Au centre de la boule de feu, on aura une pression et une température plus faibles qu'en périphérie de l'explosif en fin de détonation.

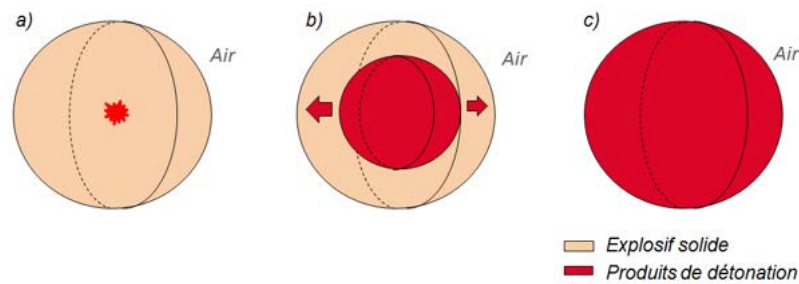


FIGURE 2.5 – Propagation d'une onde de détonation au sein d'un explosif sphérique. a : amorçage; b : détonation; c : fin de la détonation.

2.1.3 Post-combustion

2.1.3.1 Phénoménologie de la post-combustion

La fin de la détonation signe le début de la phase de post-combustion pour les explosifs déficient en oxygène. La postcombustion désigne la combustion des produits de détonation avec l'oxygène de l'air. Durant cette étape, le nuage composé par les produits de détonation prend la forme d'une sphère lumineuse avec des flammes à sa surface et a l'apparence d'une boule de feu. Elle va suivre de nombreuses phases qui auront une influence sur son apparence et sur son intensité. Ces phases successives, au nombre de quatre, ont été identifiées par KUHL *et al.* [57] au cours de simulations numériques de la phase post-combustion et se présentent comme :

- la phase d'expansion,
- la phase d'implosion,
- la phase de rechoc,
- la phase de mélange asymptotique.

Nous développerons par la suite ces différentes phases qui sont illustrées sur la Fig. 2.6 et nous identifierons les enjeux de la post-combustion.

Phase d'expansion

Dès la fin de la détonation, la boule de feu suit une expansion très rapide et voit une onde de choc sphérique émerger, se propageant vers l'extérieur. Cette onde de choc est nommée choc primaire et a pour origine une forte compression de l'air au contact de la boule de feu à la fin de la détonation. Une détente sphérique va se propager de l'interface air - produits de détonation vers le centre et rendre le fluide sur-détendu, ce qui s'accompagne de la création d'une onde de choc secondaire sphérique dans la boule de feu. Cette dernière va se propager dans la direction opposée à l'écoulement, mais dans un premier temps, en raison de la vitesse très élevée des produits de détonation, celle-ci va se diriger aussi vers l'extérieur par entraînement. Durant cette phase, le faisceau de détente va se réfléchir au centre de la boule de feu, puis va se propager également vers l'extérieur.

Phase d'implosion

Le passage du faisceau de détente à travers l'onde de choc secondaire dans la boule de feu indique le début de la phase d'implosion. Après avoir traversé l'onde de choc et l'interface air-produits de détonation, la vitesse locale de l'écoulement des produits de détonation diminue ce qui permet au choc de se diriger vers le centre de la boule de feu. La traversée de l'interface air-produits de détonation par le faisceau de détente provoque la réflexion d'une détente sphérique plus faible qui se dirige vers le centre. L'évolution de l'écoulement va alors provoquer une diminution du rayon de la boule de feu. Le choc se dirigeant vers le centre va alors s'y réfléchir.

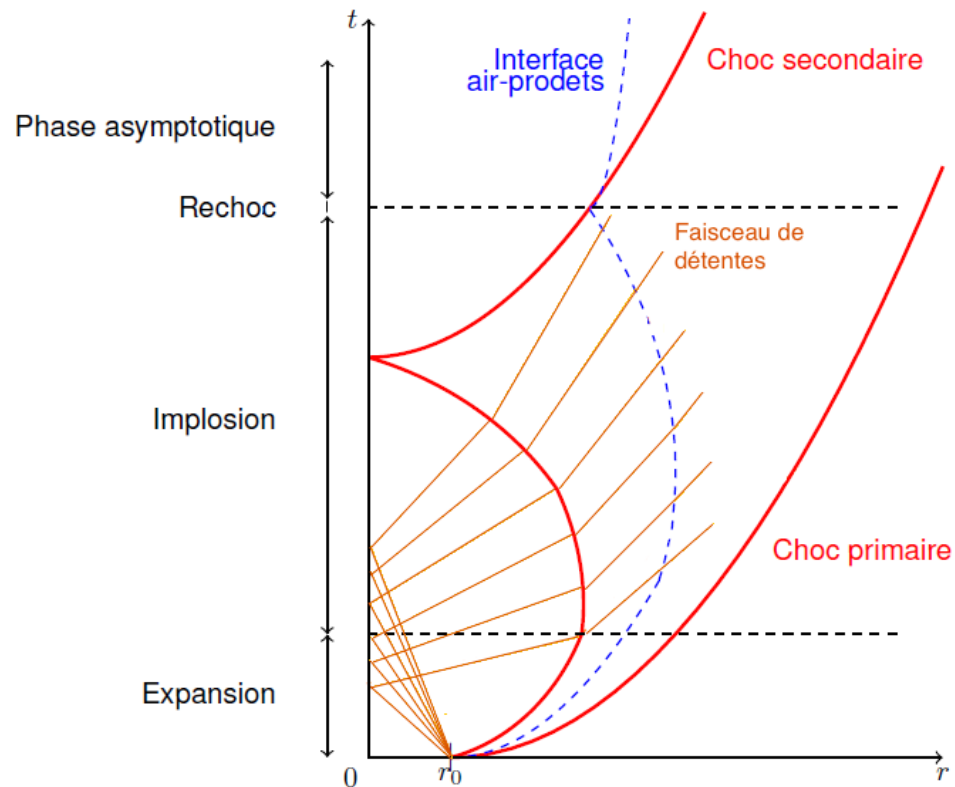


FIGURE 2.6 – Diagramme de marche pour la phase de post-combustion en géométrie sphérique ou cylindrique. (en rouge : chocs primaire et secondaire ; en bleu : interface air-produits de détonation ; en orange : ondes de détente) (figure extraite de [25]).

Phase de rechoc

Cette phase débute au passage de l'onde de choc secondaire à travers l'interface de la boule de feu. À son passage, l'intensité et la vitesse du choc augmentent à cause des transferts thermiques avec les produits de détonation. Une fois à l'extérieur, le choc secondaire continue sa propagation. Le rayon de la boule de feu augmente durant un court moment lors du passage du choc.

On notera que la sortie du choc secondaire provoque une réflexion de celui-ci au sein de la boule de feu mais avec une intensité et une vitesse plus faibles. Ainsi, il est rare d'observer un rechoc dû à un choc tertiaire après une répétition des phases précédentes.

Phase de mélange asymptotique

Cette phase correspond aux instants finaux où la taille de la boule de feu ne varie plus de manière significative. Néanmoins, le mélange avec l'air et les réactions de combustion se poursuivent.

2.1.3.2 Enjeux liés à la post-combustion

La post-combustion joue un rôle important dans le dégagement d'énergie totale. Avec les réactions de combustion entre les produits de détonation et l'air, cette phase peut contribuer jusqu'à 65 pourcents de l'énergie totale dégagée [8]. Ainsi, elle peut augmenter considérablement le souffle.

Les réactions de combustion présentes durant cette phase ont lieu au sein d'une flamme de diffusion qui est localisée dans la zone de mélange située en périphérie de la boule de feu. Or la boule de feu subit de nombreuses évolutions qui, en raison du développements d'instabilités, aboutissent à une déformation de sa surface. Elles vont alors piloter le taux de réaction dans la zone de mélange.

Pour les explosifs métallisés, comme par exemple ceux contenant des particules d'aluminium, les additifs vont avoir une influence sur la post-combustion. Durant cette post-combustion, les écoulements caractéristiques des différentes phases peuvent disperser les particules au sein de la boule de feu mais aussi à l'extérieur de celle-ci. Dès la fin de la détonation, si les particules sont passées à l'état liquide, elles vont être oxydées à la fois par les produits de détonation, puis par l'oxygène de l'air, ce qui conduit à un apport d'énergie totale dégagée plus important.

2.1.3.3 Réactions de combustion

La détonation conduit à la formation de produits tels que H_2O , CO , CO_2 , $C_{(s)}$ et N_2 . La proportion de ces espèces dans les produits de détonation va être influencée par la balance en oxygène de l'explosif. Une forte sous-oxygénation provoquera la formation de davantage de monoxyde de carbone et de suies. Pour des explosifs très déficients en oxygène, tels que le TNT, on peut également noter la présence en fin de détonation de H_2 et CH_4 .

L'analyse par spectrométrie faite par F. VOLT et F. SCHEDLBAUER [97] des produits gazeux obtenus suite à une détonation permet d'avoir une indication sur les proportions des espèces. Leur analyse s'intéresse au TNT et à une composition TNT-AN-Al 50 :25 :25, dont les résultats sont répertoriés dans le tableau 2.2. Ces données sont nécessaires pour établir les conditions initiales de la composition de la boule de feu pour la post-combustion.

TABLE 2.2 – Composition des produits de détonation du TNT et TNT-AN-Al

Espèce	X [% mol.]	TNT		TNT-AN-Al (% massique : 50,25,25)	
		X phase gazeuse [% mol.]		X [% mol.]	X phase gazeuse [% mol.]
$C_{(s)}$	35,4	-		30,1	-
H_2O	19,6	30,3		20,9	37,4
CO	17,2	26,6		14,7	26,3
N_2	13,5	20,9		12,4	22,19
CO_2	9,9	15,3		1,2	2,15
H_2	3,4	5,3		6,2	11,1
HCN	0,8	1,2		0,4	0,72
CH_4	0,2	0,3		0,06	0,1
NO	0,07	0,1		0,02	0,04
Al_2O_3	-	-		11,5	-
Al	-	-		2,5	-

À l'interface entre les produits de détonation et l'air, vont avoir lieu des réactions de post-combustion. Ces réactions sont majoritairement constituées des réactions d'oxydation du carbone solide, du monoxyde de carbone et de l'hydrogène par l'oxygène de l'air :



Ces réactions sont qualifiées d'aérobies car elles font intervenir l'oxygène de l'air. Les réactions anaérobies seront introduites plus loin dans une partie qui développera la combustion de l'aluminium avec les produits de détonation.

2.1.3.4 Instabilités hydrodynamiques de la boule de feu

Le taux de réaction étant piloté par le développement d'instabilités hydrodynamiques localisées à la périphérie de la boule de feu, il est nécessaire d'analyser les instabilités dues aux différentes phases de la post-combustion. Nous présenterons les différents types d'instabilités et leurs contributions qualitatives durant la post-combustion. Les analyses sont développées plus précisément dans la thèse de S. COURTIAUD [25].

Instabilité de Rayleigh-Taylor (RT)

L'instabilité RT [68, 91] est la première à se développer sur la boule de feu et est illustrée sur la Fig. 2.7. Elle intervient à l'interface entre des fluides de densités différentes, soumise à une accélération normale à celle-ci. Son développement connaît trois phases : la phase linéaire, la phase non linéaire et la phase turbulente.

La première est caractérisée par l'apparition de bulles de fluide léger dans le fluide lourd et d'aiguilles de fluide lourd dans le fluide léger avec une croissance exponentielle. Ensuite vient la phase non linéaire qui s'accompagne d'un élargissement des pointes des aiguilles et de la formation de tourbillons qui créent des structures en forme de champignon. Avec le cisaillement au niveau des aiguilles, des instabilités de KELVIN-HELMOLTZ se développent et de plus petites échelles de turbulence apparaissent. L'écoulement transite petit à petit vers un régime pleinement turbulent, on est alors en phase turbulente.

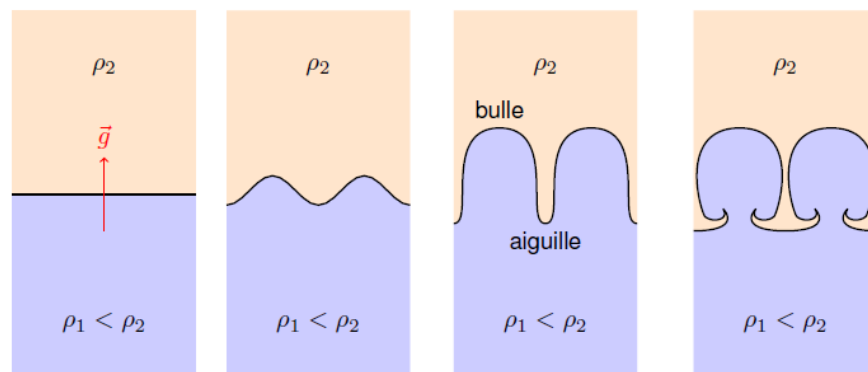


FIGURE 2.7 – Principe de formation de l'instabilité de RAYLEIGH-TAYLOR durant ses différentes phases (figure extraite de [25])

Instabilité de Richtmyer-Meshkov (RM)

L'instabilité RM [72, 82] est provoquée par l'accélération d'une interface séparant deux fluides de densités différentes par un choc s'y propageant. Un cas illustrant une onde de choc se propageant du milieu le plus dense au milieu le moins dense est présenté par la Fig. 2.8. Tout comme l'instabilité RT, celle-ci suit 3 phases : linéaire, non linéaire et turbulente. Son développement est analogue à celui de l'instabilité RT mais fait intervenir une accélération impulsionnelle. Pour des situations où la compressibilité joue un rôle important, cette analogie se vérifie moins bien.

Lors du passage du choc, on a une déformation de l'interface avec l'apparition d'une couche de tourbillons d'intensité variable. Cette déformation se caractérise par l'émergence de bulles de fluide léger et d'aiguilles de fluide lourd, suivie de la formation de structures en champignon pour le fluide léger dont les échelles de turbulence sont de plus en plus petites.

Cette instabilité a une forte dépendance aux conditions initiales (comme l'amplitude du choc et le nombre d'onde des perturbations). L'apport d'énergie nécessaire pour son développement est fourni par l'interaction de l'interface et du choc. Durant la phase non linéaire, le développement est asymétrique, la croissance des aiguilles étant plus rapide que celle des bulles.

Dans le cas de la boule de feu, l'instabilité RM intervient dans une couche de mélange déjà développée et très turbulente. L'apport d'énergie par le choc se fait sur toute la durée de la traversée de la zone de mélange.

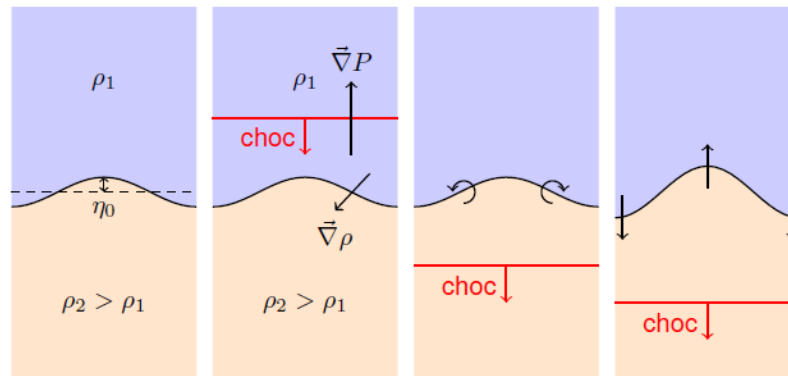


FIGURE 2.8 – Principe de formation de l'instabilité de RICHTMYER-MESHKOV aux différentes phases linéaires (figure extraite de [25])

Instabilité de Kelvin-Helmholtz (KH)

Participant dans la phase turbulente des précédentes instabilités, l'instabilité KH [48, 67] est due au cisaillement de vitesse entre deux fluides et se développe lorsque l'interface entre ces deux fluides est perturbée. Elle est illustrée sur la Fig. 2.9. La différence des vitesses induit des différences de pression entre ces deux fluides qui tendent à étirer l'interface et à augmenter l'amplitude des perturbations initiales. Lorsque l'amplitude devient suffisante, l'interface est entraînée par le fluide et commence à s'enrouler sur elle-même. On a alors l'apparition de tourbillons.

Ces instabilités interviennent dans la post-combustion et jouent un grand rôle dans le développement de la zone de mélange turbulent située en bordure de la boule de feu. Nous résumons leurs implications dans le tableau 2.3.

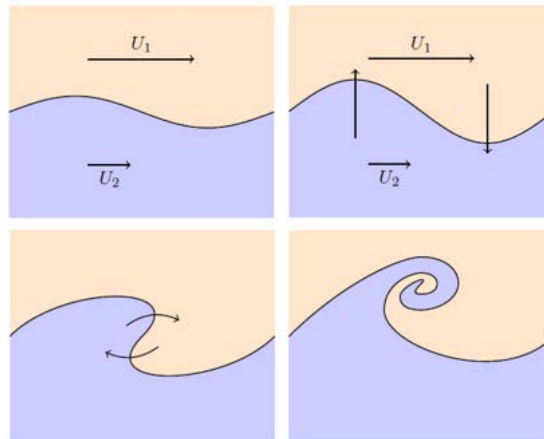


FIGURE 2.9 – Principe de formation de l'instabilité de KELVIN-HELMHOLTZ (figure extraite de [25]).

TABLE 2.3 – Apparition des instabilités durant la post-combustion

Phase de post-combustion	Instabilité produite	Cause
Expansion	RT	Différence de densité entre l'air et les produits de détonation et décélération de l'interface, Phénomène de cascade dans les structures turbulentes en champignon,
	KH	
Implosion	RT	Différence de densité entre l'air et les produits de détonation et décélération de l'interface, Diminution du rayon de la limite interne de l'interface,
	KH	
Rechoc	RM	Effet barocline et accélération due au passage du choc secondaire,

2.1.4 Onde de choc aérienne générée par une détonation

Bien que les charges explosives puissent prendre des formes diverses nous nous limiterons dans cette étude à des charges à symétrie sphérique ou cylindrique amorcées en leur centre. La détonation génère alors une onde de choc sphérique dans l'air qui se propage radialement en s'éloignant de la boule de feu avec une vitesse supersonique par rapport au milieu ambiant. Dès lors, cette onde de choc n'est plus entretenue par la post-combustion, sa célérité et son amplitude diminuent en fonction de la distance parcourue.

On représente en Fig. 2.10 le profil de pression caractéristique d'une onde de choc provenant d'une détonation aérienne à une distance r_a de l'explosif au cours du temps. L'onde de choc arrive au point d'intérêt à l'instant t_a et produit un pic de surpression positive ΔP^+ . Elle entre dans une phase de détente jusqu'à l'instant t^+ , où la pression est égale à la pression ambiante P_0 . Dans certains cas où la distance à la charge le permet, cette détente conduit à une dépression ΔP^- . Par la suite, la pression va remonter progressivement à l'équilibre thermodynamique. On note I^+ et I^- les impulsions de pression positive et négative. L'impulsion est l'intégrale du profil de surpression enregistré en un point pendant la durée où la surpression est positive pour l'un (Éq. 2.16) et associé à la phase négative pour l'autre (Éq. 2.17). Cette grandeur est importante dans l'étude des explosifs car elle définit leur capacité à soumettre une structure à un chargement prolongé.

$$I^+ = \int_0^{\infty} (P - P_0)_{P > P_0} dt \quad (2.16)$$

$$I^- = \int_0^{\infty} (P - P_0)_{P < P_0} dt \quad (2.17)$$

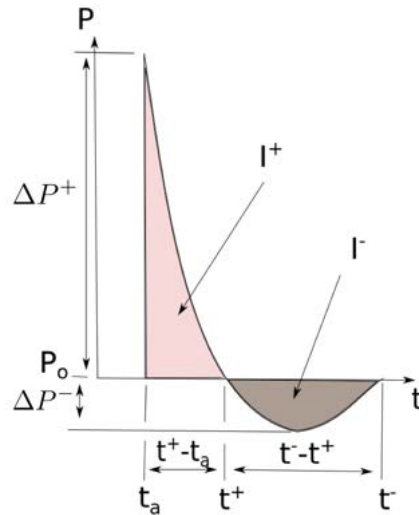


FIGURE 2.10 – Profil de pression caractéristique de l’onde de choc consécutive à une détonation (figure extraite de [6])

Comme on l’a vu dans la partie précédente, la post-combustion s’accompagne de la propagation de deux ondes de choc : l’onde de choc primaire et l’onde de choc secondaire. La Fig. 2.11 schématise le profil spatial de la pression à un instant t_a donné, en l’absence d’effet de sol. Ce phénomène va avoir une influence sur l’impulsion grâce à une augmentation de l’intensité de la phase positive de la pression et de sa durée.

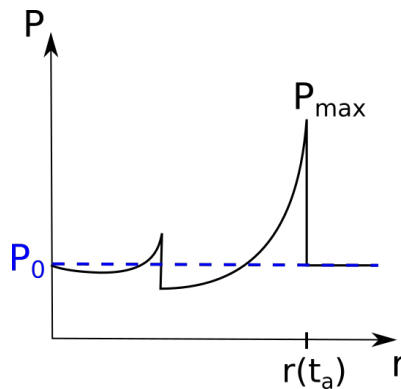


FIGURE 2.11 – Profil spatial de pression à un instant t_a donné

2.2 L'aluminium au sein de la post-combustion

Dans le domaine de la détonique, l'étude des compositions explosives contenant de l'aluminium est courante. Des études sont menées, comme pour notre cas, sur l'aluminium présent dans les explosifs solides tel que le TNT ou le RDX [94, 24], mais des études sont aussi menées sur les explosifs liquides, tels que le nitrométhane, où les particules sont placées initialement autour de l'explosif [36, 44]. Malgré les différences d'état physique de l'explosif et de la disposition initiale des particules, ce second cas est intéressant pour l'analyse du phénomène de combustion des particules d'aluminium durant les phases de la post-combustion.

Cette section a pour objectif de présenter des travaux sur les différents effets de l'aluminium sur les phases de la post-combustion et sur la détonation qui précède cette dernière..

2.2.1 Effet des particules d'aluminium sur la détonation

L'analyse de la détonation de charges explosives contenant des particules d'aluminium est nécessaire pour connaître l'état des particules au début de la postcombustion. L'effet de l'aluminium sur l'onde de détonation a été le thème d'étude des travaux de T. ELIA [32] dont le sujet était l'analyse théorique et expérimentale de l'amorçage des explosifs composites aluminisés. La Fig. 2.12 présente l'évolution de la célérité de détonation dans du HMX¹ contenant des particules d'aluminium de différentes tailles et fractions massiques. La présence des particules dans l'explosif solide va ralentir l'onde de détonation en ayant un effet endothermique. Ainsi l'augmentation de la fraction massique pour une même taille de particules ou la réduction de la taille des particules diminuera la vitesse de l'onde à cause du chauffage des particules. La vitesse de propagation de l'onde de détonation n'est pas le seul paramètre impacté par la présence des particules, car la température des produits de combustion et la pression de détonation vont elles aussi diminuer. Pour le cas du HMX, la variation du chargement en particules d'aluminium de 50 μm provoquerait une diminution de température d'environ 750 K lors du passage de la fraction massique de 0 % à 25 %. En ce qui concerne la pression de détonation du HMX, M. F. GOGULYA *et al.* [41] ont tracé le profil temporel de pression en faisant varier la fraction massique de particules d'aluminium de 15 μm et les résultats mettent en avant que la pression diminue d'environ 7 GPa pour un chargement passant de 0 % à 10 % d'aluminium.

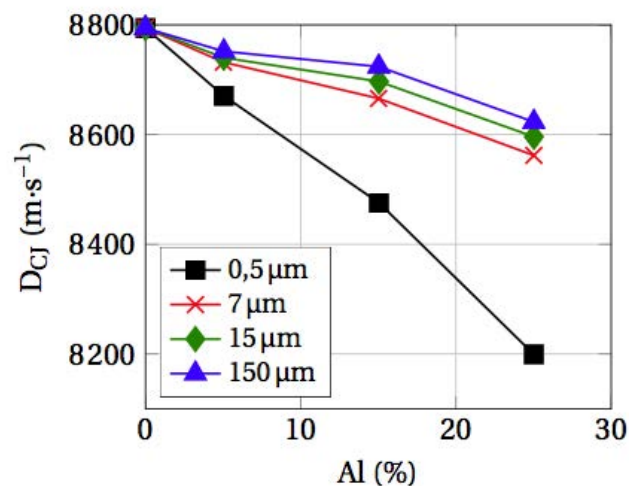


FIGURE 2.12 – Évolution de la célérité de détonation expérimentale en fonction du taux de chargement en aluminium et de la taille des particules d'aluminium pour le HMX (figure extraite de [32])

1. octogène

Initialement, la particule d'aluminium est solide et est à température ambiante dans la charge explosive. Elle est chauffée lors du passage de l'onde de détonation. Ce chauffage va être rapide et intense pendant l'intervalle de temps qui suit le passage de l'onde. G. BAUDIN *et al.* [9] ont fait une étude analytique du chauffage de la particule d'aluminium après le passage de l'onde de détonation en prenant en compte la détente des produits de détonation, l'évolution de la température de fusion de la particule en fonction de la pression et la conduction à l'intérieur de la particule. Pour le cas de la composition B3103, qui est une composition explosive HMX-Al-liant active (% massique : 51,19,30), les propriétés numériques CJ de l'onde de détonation sont présentées dans le tableau 2.4.

TABLE 2.4 – État CJ pour la composition B3103 [9]

Définition	Paramètre	Valeur
Célérité de détonation	D_{CJ} (m·s ⁻¹)	7810
Pression de détonation	P_{CJ} (GPa)	27,8
Température de détonation	T_{CJ} (K)	4000

Durant l'intervalle de temps qui suit le passage de l'onde de détonation, le gaz va chauffer les particules d'aluminium jusqu'à ce que certaines atteignent leur température de fusion. Cette température de fusion diminue avec la détente en passant d'environ 2300 K pour 27,8 GPa à 1200 K pour 3,3 GPa. La durée nécessaire pour changer de phase, qui peut être considérée comme le temps d'allumage, va augmenter avec la taille des particules et elle est illustrée sur la Fig. 2.13. Sur ce graphique, on retrouve en ordonnée la température des produits de détonation, celle des particules et de la température de fusion et le temps en abscisse. Ce temps débute à 30 μ s qui est le délai nécessaire à l'onde de détonation pour atteindre une particule initialement placée à 234 mm du centre de la charge. Pour des petites particules de 15 μ m de diamètre, la température en surface et au centre dépasse la température de fusion, qui est à 2216 K pour cette pression, en 2,4 μ s. Pour des particules plus grosses dont le diamètre est de 30 μ m, leur température dépasse la température de fusion, qui est à 2096 K, en 5,4 μ s. Ainsi plus la taille des particules augmente, plus le temps de chauffage nécessaire à la fusion de l'aluminium est long et une différence entre la température de surface et celle du centre peut être constatée. L'analyse a été poussée jusqu'à des particules dont le diamètre est de 160 μ m. Ces particules ont une température en leur centre qui dépasse le seuil de fusion en 64,8 μ s avec une température de fusion à 1194 K.

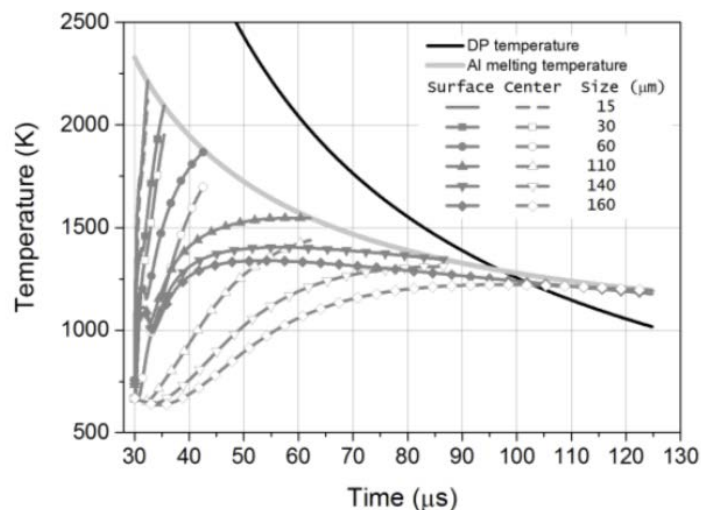


FIGURE 2.13 – Chauffage des particules durant la détonation selon leur diamètre (figure extraite de [9])

D'après ces résultats, il est probable que la grande majorité des particules d'aluminium, mise à part les grosses particules, soient sous la forme liquide au début de la post-combustion et à haute température. Dans ces conditions, le phénomène de fragmentation (« break-up ») peut intervenir. Ce phénomène aura pour conséquence de scinder les particules, de réduire leur taille et d'augmenter leur surface d'échange.

D'autres phénomènes peuvent intervenir lors du passage de l'onde de détonation sur les particules comme leur déformation et l'interaction entre les phases. Ces éléments ont été étudiés numériquement par R. C. RIPLEY *et al.* [83] avec des simulations 2D et 3D à l'échelle mésoscopique de l'interaction d'une onde de détonation se propageant dans du nitrométhane contenant des particules sphériques d'aluminium en suspension. Lors du passage de l'onde sur les particules, le champ de pression généré va déformer les particules. Un exemple de déformation de particules est illustré sur la Fig. 2.14 qui est un résultat des travaux de R. C. RIPLEY.

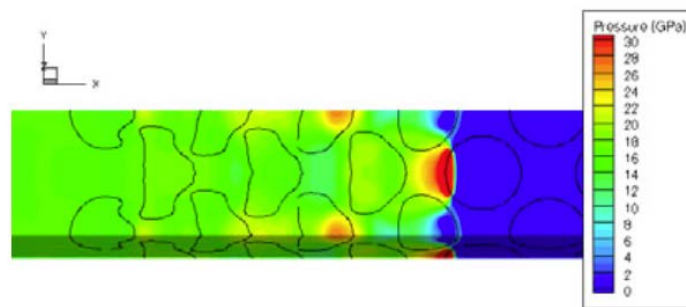


FIGURE 2.14 – Distribution de pression et déformation des particules par le passage de l'onde de détonation (image extraite de [83])

L'interaction entre les particules d'aluminium et l'onde de détonation du nitrométhane dépend de la taille des particules. Le temps d'interaction entre la particule et l'onde t_s représente le temps nécessaire à l'onde pour contourner la particule de diamètre d_p et une onde se propageant à une vitesse D :

$$t_s = \frac{d_p}{D}. \quad (2.18)$$

Ainsi, ils établissent des facteurs de transmission de quantité de mouvement α et de température β de l'onde de détonation vers les particules d'aluminium. Quelques exemples sont donnés dans ces travaux. Pour des interactions courtes de l'ordre de $t_s=0,1$ ns, les coefficients α et β sont respectivement à 0,419 et 0,303. Pour des interactions plus longues de l'ordre de $t_s=4,5$ ns, les coefficients α et β sont respectivement à 0,357 et 0,259. Ces résultats ne sont rigoureusement valables que pour les particules présentes dans le nitrométhane et pour des fractions volumiques d'aluminium supérieures à 25 %. Mais ces coefficients peuvent être un bon point de départ pour initialiser la vitesse et la température des particules dans les simulations.

2.2.2 Contribution énergétique de l'aluminium

Une fois la détonation terminée, la post-combustion débute avec une expansion de la boule de feu et l'émission d'une onde de choc vers l'extérieur. Durant cette phase, l'aluminium sera majoritairement présent dans la boule de feu et sera en contact avec les produits de détonation. L'aluminium rencontrera l'air en périphérie de la boule de feu après la phase d'expansion. Ainsi ce phénomène regroupera des réactions anaérobies entre les produits de détonation et les particules et des réactions aérobies qui auront lieu soit entre les produits de détonation et l'air, soit entre les particules et l'air. Les travaux de J. LEADBETTER *et al.* [63] ont mis en avant les contributions de ces réactions sur l'ensemble de l'énergie dégagée par la charge explosive contenant des particules d'aluminium. Ses résultats, illustrés en Fig. 2.15, sont obtenus à

partir d'une modélisation numérique eulerienne pour les deux phases et la prise en compte des transferts de chaleur, de mouvement et des réactions entre les phase gazeuse et liquide. Néanmoins ces cas numériques sont réalisés en fluide parfait ce qui empêche l'obtention d'une zone de mélange. L'air et les produits de détonation sont donc séparés par une interface. Cela peut modifier la nature du milieu dans lequel se trouvent les particules.

Dans son étude, différentes tailles de charge et deux distributions de particules sont analysées, la distribution H10 (dont le diamètre des particules est $d_p=13\pm 10\ \mu\text{m}$) et H50 (dont le diamètre des particules est $d_p=54\pm 20\ \mu\text{m}$). Sur la Fig. 2.15, on constate que la contribution énergétique de la détonation est la contribution principale pour les petites charges contenant des particules H50. Mais lorsque la taille de la charge explosive augmente, les réactions aérobies s'intensifient grâce aux réactions de combustion à l'interface de la boule de feu et aux particules d'aluminium qui chauffent dans la zone de mélange et brûlent dans l'air choqué. Pour des particules de plus petite taille, elles vont chauffer suffisamment vite pour réagir avec les produits de détonation. Ainsi on a une forte contribution des réactions anaérobies entre les particules et les produits de détonation.

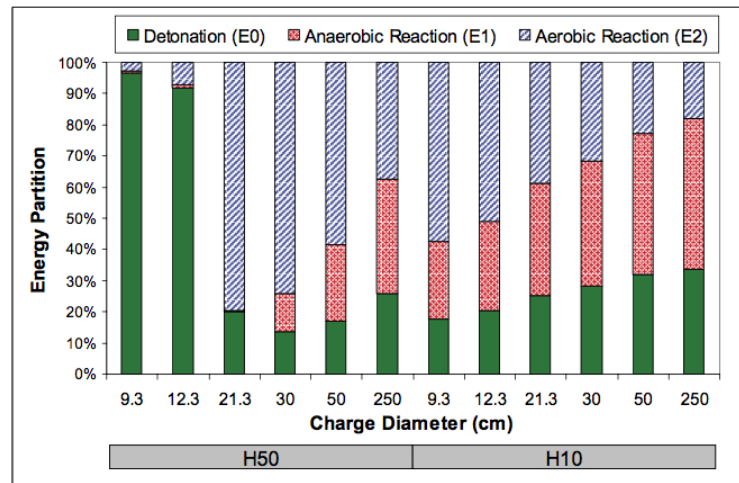


FIGURE 2.15 – Contribution énergétique de la détonation, des réactions anaérobies et des réactions aérobies (figure extraite de [63])

2.2.3 Mesures expérimentales

Les travaux expérimentaux sur la détonation des charges explosives contenant des particules d'aluminium sont nombreux dans la littérature. Mais la mesure des grandeurs d'intérêt est limitée à cause de la violence et de la rapidité des phénomènes mises en jeu. Quelques cas sont présents dans la littérature avec des mesures faites durant la post-combustion comme des visualisations directes ou des mesures de pression dans l'air. Dans les travaux de W. A. TRZCINSKI *et al.* [94] des mesures du souffle émis par une charge explosive cylindrique de 268 g de TNT, puis de RDX-Al ont été mesurées et comparées en Fig. 2.16 et 2.17. Pour la charge explosive contenant les particules d'aluminium, différents cas faisant varier la concentration d'aluminium ont été expérimentés. L'analyse du pic de surpression de l'onde incidente montre que l'aluminium n'a aucun impact sur l'onde de choc générée après la détonation pour des fractions massiques d'aluminium inférieures à 30 %. Pour des fractions massiques plus importantes, l'effet endothermique de l'aluminium durant la détonation conduit à une baisse de l'intensité du pic de surpression de l'onde incidente. Mais l'intérêt d'inclure des particules d'aluminium dans l'explosif se retrouve dans les mesures de l'impulsion aérienne. Les particules d'aluminium vont réagir avec les produits de détonation et l'air derrière le front de détonation, dégager de l'énergie et augmenter l'impulsion.

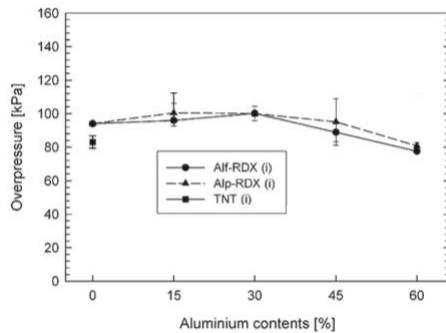


FIGURE 2.16 – Mesures des pics de surpression de l'onde incidente des charges explosives aluminisées RDX et TNT [94]

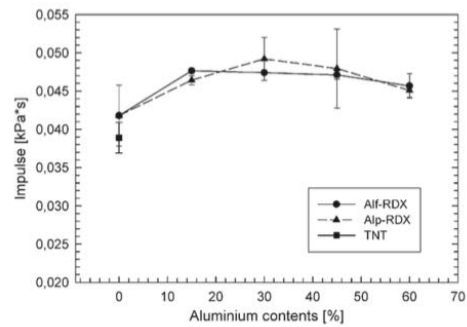


FIGURE 2.17 – Mesures de l'impulsion du souffle des charges explosives aluminisées RDX et TNT [94]

M. A. COOPER *et al.* [24] ont aussi travaillé sur le souffle émis par des charges explosives à base de RDX contenant des particules d'aluminium et ont étudié l'influence de la fraction massique d'aluminium ainsi que celle de la taille et de la forme des particules. Dans l'analyse de l'impulsion, ils ont constaté que les performances étaient plus faibles avec des concentrations importantes d'aluminium et des petites particules que pour le cas sans particules. Lorsque les particules d'aluminium introduites dans la composition énergétique sont de l'ordre du nanomètre, celles-ci ont une fraction oxydée initiale importante ce qui l'empêche de libérer la totalité de leur potentiel énergétique durant la combustion. Cette fraction oxydée initiale est essentiellement sous la forme de couche d'alumine protectrice autour des particules d'aluminium et a été présentée dans le chapitre 1 lors de l'étude de l'allumage de l'aluminium. Pour les particules sous la forme de flocons, la fraction d'aluminium pure est plus grande, ce qui leur permet, en étant oxydées par l'air, de contribuer davantage à l'augmentation de l'impulsion.

Une autre conséquence de la présence des particules d'aluminium constatée par les auteurs lors de la post-combustion de charges explosives est la variation de la durée pendant laquelle une intense lumière est émise par la boule de feu. La durée d'émission de cette intense lumière par les produits de détonation lors de l'expansion de la boule de feu augmente lors de la présence des particules métalliques dans l'explosif. La Fig. 2.18 illustre l'évolution de la boule de feu d'une charge explosive de 650 g contenant des particules d'aluminium nanométriques. On constate que la boule de feu émet une intense lumière lors de l'expansion (de 40 μ s à 100 μ s) et à partir du rechoc (de 140 μ s à 180 μ s).

Pour les mesures à l'intérieur de la boule de feu ; comme la température et la pression, les données sont plus rares dans la littérature. Cette difficulté est due aux conditions extrêmes de température et de pression qu'atteignent les appareils de mesures et à l'intensité des mouvements turbulents qui ont lieu au sein de la boule de feu. Ainsi des développements complexes de diagnostics sont réalisés pour sonder l'écoulement à l'intérieur de la boule de feu et mesurer la température des particules, du gaz, la pression, la densité et la vitesse des particules. [36]

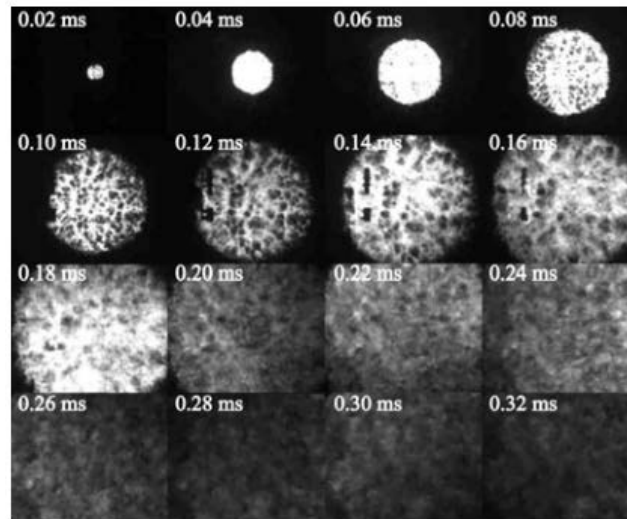


FIGURE 2.18 – Séquence d’images de la boule de feu d’une charge explosive RDX-AI (image extraite de [24])

2.2.4 Modélisation de la post-combustion avec des particules d’aluminium

Les travaux sur la modélisation de la post-combustion sans particule métallique sont récents dans la littérature. A. L. KUHLE *et al.* [58] est l’un des premiers auteurs à modéliser ce phénomène et à analyser l’impact des instabilités présentes à la surface de la boule de feu sur la post-combustion des produits de détonation avec l’air. Plus récemment, S. COURTIAUD [25] a analysé ce phénomène avec le code simulation AVBP du CERFACS. La Fig. 2.19 représente des extraits d’une simulation d’un écoulement inerte représentatif de celui ayant lieu pendant la post-combustion à plusieurs instants. Sur ces images, on constate la propagation des chocs primaire et secondaire avec la croissance d’instabilités qui, dans le cas réel, étirent la zone de mélange et augmentent la surface de réaction.

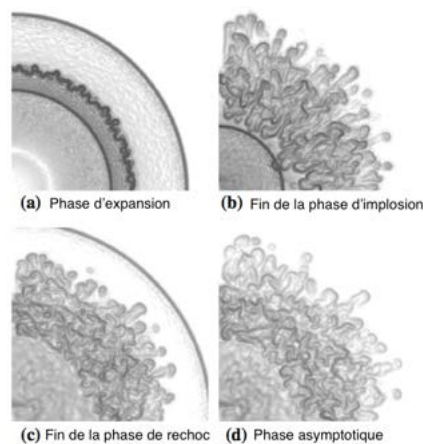


FIGURE 2.19 – Séquence d’images montrant l’évolution du gradient de densité extraites d’une simulation inerte de post-combustion (image extraite de [25])

Les travaux sur la modélisation de la combustion de particules d’aluminium durant la post-combustion sont de plus en plus d’actualité dans le milieu de la détonique et quelques cas peuvent être trouvés dans

la littérature. Les travaux de thèse de E. FEDINA [35] sont consacrés à la réalisation de simulations de post-combustion avec des particules d'aluminium. Dans ses cas d'étude, elle ne prenait en compte que la combustion des particules d'aluminium avec l'air et la phase dispersée était modélisée de façon eulérienne. Comme le montre la Fig. 2.20, les particules d'aluminium chauffent dans la zone de mélange et réagissent avec l'air. Cette combustion augmente l'intensité du souffle et les particules sont entraînées par les instabilités se trouvant dans la zone de mélange.

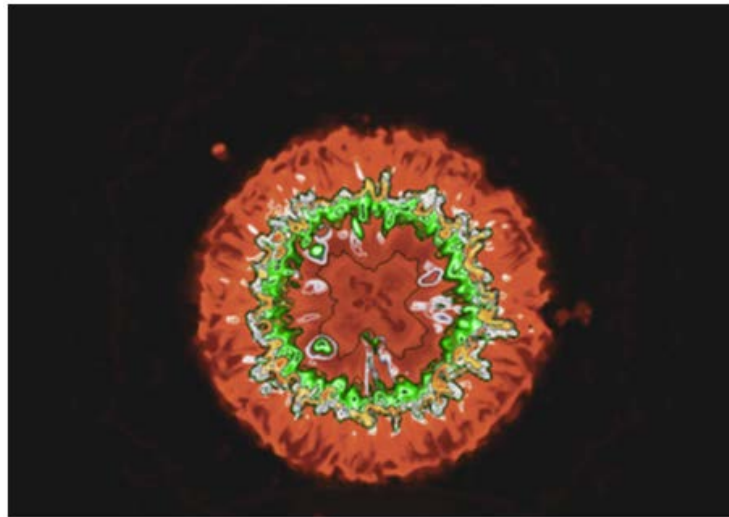


FIGURE 2.20 – Visualisation de la modélisation de la post-combustion d'une charge explosive contenant des particules d'aluminium avec les zones à haute température (en orange), la chaleur dégagée lors de la combustion entre les produits de détonation et l'air (vert), et la chaleur dégagée lors de la combustion entre l'aluminium et l'air (gris) (image extraite de [35])

Cette interaction entre les instabilités et la combustion des particules d'aluminium dans la zone de mélange a aussi été étudiée par K. C. GOTTIPARTHI *et al.* [44]. Son étude menée sur les explosifs liquides, dont un extrait est en Fig. 2.21, a montré que la phase d'expansion entraîne les particules vers l'extérieur, les mettant en contact avec la zone de mélange et les instabilités. Ainsi une première phase de combustion des particules et de production d'alumine a lieu. Ensuite, la phase d'implosion va entraîner les particules à l'intérieur de la boule de feu, et ralentir la combustion des particules d'aluminium avec l'air, jusqu'à la phase de rechoc. Cette phase va entraîner une nouvelle fois les particules d'aluminium vers l'extérieur. Grâce aux instabilités qui ont permis de faire entrer de l'air dans la zone de mélange, les particules vont brûler et produire d'avantage d'alumine dans cette zone.

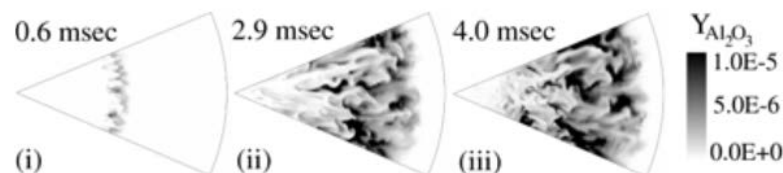


FIGURE 2.21 – Extrait de la formation de l'alumine durant la post-combustion à la phase d'expansion (i), d'implosion (ii) et de rechoc (iii) (image extraite de [44])

D'autres études, comme celles de D. L. FROST *et al.* [36], ont suivi la dispersion des particules durant la post-combustion d'un explosif liquide. À partir des simulations Euler-Euler et en prenant en compte la combustion de l'aluminium avec l'air et les produits de détonation, ils ont pu obtenir des diagrammes de marche comme celui illustré en Fig. 2.22. Pour le cas des particules d'aluminium de diamètre H10 ($13 \pm 10 \mu\text{m}$) et une charge de diamètre 21,3 cm, les particules en contact avec les produits de détonation refroidissent rapidement à cause de la détente des gaz. Ainsi, les particules qui seront assez chaudes pour passer le seuil de la fusion sont situées autour de la zone de mélange ou l'ont traversée. Durant les premiers instants, les particules entraînées par le choc primaire vont être chauffées par la zone de mélange et réagir avec l'air et les produits de détonation. Ensuite la majorité des particules qui brûleront seront celles situées proche de l'interface de la boule de feu. Pour le cas où les particules sont plus grosses, le refroidissement des particules prendra plus de temps et la zone de combustion des particules sera élargie dans l'air lors du passage des particules à travers la zone de mélange.

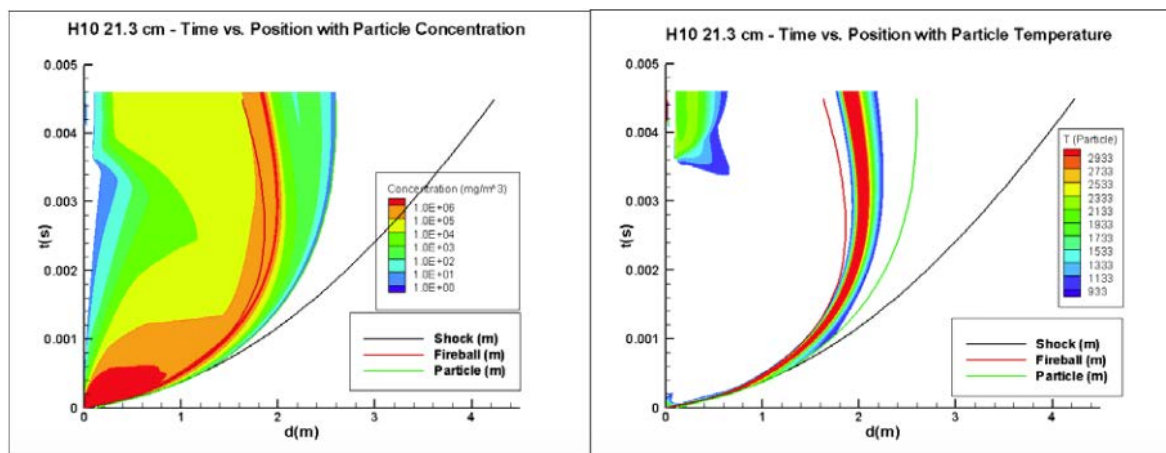


FIGURE 2.22 – Diagramme de marche avec la concentration des particules (à gauche) et avec la température des particules (à droite) [36]

L'ensemble des travaux précédemment cités sur la post-combustion avec des particules d'aluminium, sauf ceux de E. FEDINA [35], étaient des cas d'étude sur des charges explosives liquides de nitrométhane. L'analyse que l'on peut faire sur ce type d'explosif est différente de celle sur les explosifs solides. Contrairement aux explosifs solides, les particules sont présentes initialement à l'extérieur de l'explosif pour le cas des explosifs liquides. Ensuite l'intensité de l'onde de détonation est plus faible pour le cas de l'explosif liquide que pour le même volume d'un explosif solide. Mais son étude reste intéressante sur la dispersion et la combustion des particules d'aluminium. Pour ce qui est de la simulation Euler-Lagrange de la post-combustion des charges explosives solides, le nombre de cas est très réduit dans la littérature. On peut néanmoins citer les travaux de C. K. KIM *et al.* [56] font partie de ces cas. Dans son étude, il modélise la post-combustion d'une charge de TNT contenant 10 % d'aluminium dont le diamètre moyen est de $5 \mu\text{m}$. Comme l'illustre la Fig. 2.23, les premiers instants sont proches de ce qui peut être observé en champ libre avec la propagation du choc primaire vers l'extérieur et un choc secondaire à l'intérieur de la boule de feu. Cette boule de feu contient des particules qui vont être entraînées par l'expansion vers l'extérieur en passant par la zone de mélange. Ainsi une partie de l'aluminium va brûler dans l'air et une autre avec les produits de détonation.

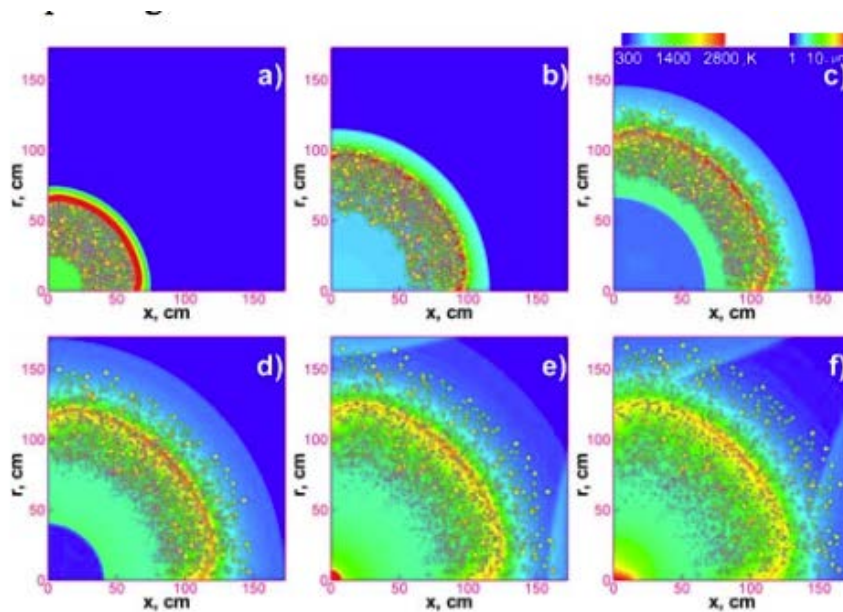


FIGURE 2.23 – Propagation progressive de l'explosion du TNT avec des particules d'aluminium à 300 μs (a), 600 μs (b), 900 μs (c), 1200 μs (d), 1500 μs (e) et 1800 μs (f) [56]

2.3 Conclusion sur la post-combustion d'après la littérature

La post-combustion représente une partie non négligeable de l'énergie totale dégagée par un explosif condensé. Ce phénomène peut être découpé en quatre phases qui permettent de décrire l'évolution de la boule de feu et celle des ondes de choc : l'expansion, l'implosion, le rechoc et la phase asymptotique. Ces différentes phases s'accompagnent de l'évolution d'instabilités présentes dans la zone de mélange de la boule de feu. Elles améliorent les taux de réaction dans cette zone. Mais l'ajout des particules d'aluminium au sein de l'explosif aura une influence sur la détonation et la post-combustion.

Durant la détonation, les particules vont avoir un comportement endothermique. Elles vont diminuer l'intensité de l'onde de détonation par rapport au cas sans particule métallique. Une partie de l'énergie de la détonation est transférée aux particules d'aluminium solide sous la forme de quantité de mouvement et de chaleur. Ainsi au passage de l'onde de détonation, les particules d'aluminium sont mises en mouvement et sont chauffées, mais restent sous forme solide à cause de la forte pression des produits de détonation qui augmente leur température de fusion. Dans les instants suivant la détonation, une détente du gaz a lieu et va abaisser la température de fusion de l'aluminium et leurs permettre de changer de phase. Ainsi l'aluminium peut s'évaporer et réagir avec les produits de détonation et l'air.

L'analyse de la post-combustion des charges explosives contenant des particules d'aluminium est présente dans la littérature. Dans le domaine expérimental, des visualisations directes et des mesures de surpression aérienne ont été réalisées et comparées à des cas sans particules. Les principales différences sont une émission plus intense de lumière durant les deux premières phases de la post-combustion et une impulsion plus forte. Cette dernière est liée à l'influence des particules dans la boule de feu. Les modélisations numériques de ce phénomène ont montré que les particules d'aluminium avaient une interaction avec la zone de mélange et réagissaient avec les produits de détonation, mais aussi avec l'air. En réagissant avec ces milieux gazeux, la combustion dégage de l'énergie qui aura une influence sur le choc secondaire qui se propage dans la boule de feu durant la phase d'expansion et d'implosion. Mais les études numériques sur la post-combustion restent peu nombreuses et les modèles utilisés pour la combustion de l'aluminium sont simples et prennent rarement en compte la présence des particules d'alumine.

Dans les chapitres 7 et 8, les études expérimentales et numériques sont prises en compte pour modéliser la post-combustion de charges explosives contenant des particules d'aluminium. Cette étude fait suite aux travaux de S. COURTIAUD [25] qui a modélisé la post-combustion sans particules métalliques avec le code de simulation AVBP. La modélisation des particules se rapprochera de celle de C. K. KIM *et al.* [56] qui a une approche lagrangienne. Les modèles de combustion employés dans ces travaux sont présentés à la fin du chapitre 3.

Chapitre 3

Outils et modèles exploités

Ce chapitre présentera l'ensemble des outils numériques utilisés dans ces travaux comme AVBP, CANTERA et des outils provenant du CEA. Un développement sera fait sur le code AVBP qui modélise la phase gazeuse, la phase dispersée et la combustion diphasique. Ce chapitre se terminera sur la présentation des outils de post-traitement réalisés sur PYTHON pour tracer les diagrammes de marche des simulations de post-combustion faites avec AVBP.

3.1 Principaux outils

3.1.1 AVBP

AVBP est un code de calcul CFD (Computational Fluid Dynamics). Il est développé par le CERFACS avec l'aide de plusieurs partenaires académiques, tels que l'IMFT et le laboratoire EM2C (Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Combustion) du CNRS. Il est utilisé aussi bien dans l'industrie, par exemple par Safran, que dans la recherche. Massivement parallèle, AVBP résout les équations de conservation de la mécanique des fluides en 2D et en 3D sur des maillages non-structurés avec une approche LES (Large Eddy Simulation) ou DNS (Direct Numerical simulation), et permet de simuler des écoulements réactifs. Ses champs d'application classiques recouvrent la propulsion aéronautique et spatiale et les moteurs à pistons, mais il a également été utilisé dans une étude de la transition entre régimes de combustion en phase gazeuse. Ces informations ont été extraites du site web d'AVBP [1].

3.1.2 CANTERA

Cantera est une suite logicielle libre et open-source de thermocinétique. Orienté objet, cet outil est majoritairement codé en C++ mais dispose d'interfaces pour différents langages de programmation tels que Python, Matlab et Fortran 90. Il permet de créer des objets représentant notamment des phases, des interfaces entre ces phases, des réacteurs chimiques, et des écoulements réactifs monodimensionnels. Grâce à cet outil, il est possible de calculer des équilibres chimiques et de simuler, par exemple, la propagation de flammes monodimensionnelles ou des problèmes d'auto-allumage. L'équation d'état utilisée par Cantera est celle des gaz parfaits. Dans le cadre de cette étude, Cantera a été utilisé pour réaliser des calculs d'équilibre chimique pour la combustion de l'aluminium et valider les propriétés thermodynamiques introduites. Ces informations ont été extraites du site web de CANTERA [2].

3.1.3 ALEXIA

Le code ALEXIA a été développé au CEA Gramat et est un code de détonique et d'hydrodynamique rapide. Il utilise une approche ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) et résout des problèmes de détonation et de propagation de souffle en configuration 1D plan, 1D sphérique et 1D cylindrique. En partant d'une masse d'explosif donnée, il calcule les conditions CHAPMAN- JOUGUET et simule l'écoulement des produits de détonation et de l'air. [25]

3.2 Modélisation de la phase gazeuse

Cette section présente les modèles et équations utilisés afin de résoudre la phase gazeuse dans le code AVBP. L'objectif ici n'est pas de développer la résolution numérique des équations mais de donner les éléments nécessaires pour les parties suivantes et de poser les hypothèses utilisées dans la suite de ces travaux.

3.2.1 Système d'équations

La modélisation de la phase gazeuse est réalisée à partir de la résolution du système d'équations de conservation. L'interaction avec la phase dispersée se fait par l'intermédiaire des termes sources S_*^l . Le système d'équations de conservation définit l'écoulement comme étant un écoulement compressible multi-espèces où ont lieu des réactions chimiques et s'écrit :

— l'équation de conservation des espèces :

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_k u_j)}{\partial x_j} = - \underbrace{\frac{\partial[J_{j,k}]}{\partial x_j}}_I + \underbrace{\dot{w}_k}_{II} + S_{m,k}^l; \quad (3.1)$$

où le terme (*I*) est le flux diffusif de l'espèce k et le terme (*II*) les taux de formation ou de consommation de l'espèce k à partir des réactions qui ont lieu. Les symboles ρ_k , u_j et S_m^l sont respectivement la masse volumique de l'espèce k , son vecteur vitesse et son terme source massique entre la phase gazeuse et dispersée.

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

$$\underbrace{\frac{\partial \rho u_i}{\partial t}}_I + \underbrace{\frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j}}_{II} = - \underbrace{\frac{\partial P \delta_{ij}}{\partial x_j}}_{III} + \underbrace{\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}}_{IV} - S_{qdm,i}^l \quad (3.2)$$

avec

$$\tau_{ik} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \quad (3.3)$$

où de gauche à droite on trouve : le terme instationnaire (*I*), le terme de transport convectif (*II*), le gradient de pression (*III*) et les contraintes visqueuses (*IV*). Les symboles ρ , τ_{ik} et S_{qdm}^l sont respectivement la densité du gaz, la composante du tenseur des contraintes visqueuses et le terme source de quantité de mouvement entre la phase gazeuse et dispersée.

— l'équation de conservation de l'énergie totale non chimique :

$$\underbrace{\frac{\partial \rho e_t}{\partial t}}_I + \underbrace{\frac{\partial(\rho e_t + P \delta_{ij}) u_i}{\partial x_j}}_{II} = \underbrace{\frac{\partial q_j}{\partial x_j}}_{III} + \underbrace{\frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j}}_{IV} + \underbrace{\dot{w}_T + Q_r}_{V} - S_E^l \quad (3.4)$$

où à gauche, on reconnaît le terme instationnaire (*I*) et le transport convectif (*II*), à droite, apparaissent la conduction thermique (*III*), la dissipation visqueuse (*IV*), le terme source d'énergie lié aux réactions chimiques et radiatifs (*V*). Les symboles e_t , P et S_E^l sont respectivement l'énergie totale, la pression et le terme source d'énergie entre les phases gazeuse et dispersée ;

Pour fermer le système d'équations, une équation d'état reliant la pression, la température et la masse volumique est nécessaire. En considérant que le gaz est parfait, l'équation d'état s'écrit :

$$P = \rho r T \quad (3.5)$$

avec

$$r = \frac{R}{W} \quad (3.6)$$

où R est la constante universelle des gaz parfaits et où W est la masse molaire du mélange.

Les termes S_*^l présents dans les équations (3.1), (3.2) et (3.4) représentent respectivement les termes source de l'espèce k , de quantité de mouvement et d'énergie issus du couplage entre les phases liquide et gazeuse. L'expression de ces termes est détaillée en partie 3.3.3.

3.2.2 Modélisation des coefficients de transport

Les modèles avancés pour les coefficients de transport, utilisés dans des solveurs cinétiques comme CANTERA sont trop coûteux pour des simulations DNS (Direct Numerical simulation). Des approches simplifiées, présentées dans cette section, sont alors utilisées [79].

La viscosité dynamique μ est supposée être indépendante de la composition du gaz et être proche de celle de l'air. La loi classique de Sutherland est alors utilisée :

$$\mu = \mu_{ref} \frac{T^{3/2}}{T+B} \frac{T_{ref} + B}{T_{ref}^{3/2}} \quad (3.7)$$

où μ_{ref} et B sont déterminés de façon à correspondre à la viscosité réelle du mélange pour l'air et l'aluminium avec ses oxydes. Pour le cas de l'air seul à $T_{ref} = 273 \text{ K}$, $\mu_{ref} = 17,1 \text{ mg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}$ et $B = 110,4 \text{ K}$. Une seconde loi, appelée loi de puissance est disponible, où la viscosité moléculaire s'exprime :

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (3.8)$$

où b est typiquement entre 0,5 et 1,0. Pour l'air on a $b = 0,76$.

Pour un nombre de Prandtl Pr donné, le coefficient de conduction thermique du mélange s'écrit :

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (3.9)$$

où $C_p = \sum_{j=1}^{n_{spec}} C_{pj} Y_j$ est la capacité thermique massique à pression constante du mélange.

Les coefficients de diffusion moléculaire D_k sont déterminés en supposant que le nombre de Schmidt Sc_k des espèces est constant. Ainsi le coefficient de diffusion de chaque espèce est obtenu par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k}. \quad (3.10)$$

Le nombre de Lewis Le définit le rapport entre la diffusivité thermique α et la diffusivité moléculaire moyenne du mélange D :

$$Le = \frac{\alpha}{D} = \frac{\lambda}{D \rho C_p}. \quad (3.11)$$

Le nombre de Lewis peut également être exprimé avec les nombres de Prandtl Pr et de Schmidt Sc d'après l'Éq 3.12. Ce nombre permet d'évaluer si le mouvement de la particule est dominé par son inertie ou par l'écoulement.

$$Le = \frac{Sc}{Pr}. \quad (3.12)$$

3.2.3 Modélisation de la combustion

Dans AVBP, la combustion intervient dans les équations de conservation à travers les variables \dot{w}_T et \dot{w}_k qui sont respectivement le taux de dégagement de chaleur et la vitesse de réaction de l'espèce k . Elles sont définies à partir de la loi d'ARRHENIUS décrivant la cinétique avec M réactions et qui font intervenir chacune N espèces M_k (Éq. 3.13) avec un coefficient v'_k pour les réactifs et v''_k pour les produits [79].

$$\sum_{k=1}^N v'_{kj} M_{kj} \Rightarrow \sum_{k=1}^N v''_{kj} M_{kj}, \quad j \in [1, M] \quad (3.13)$$

La vitesse de réaction de l'espèce k est constituée de la somme des vitesses de l'espèce k dans les M réactions du schéma (Éq. 3.14). L'expression de la vitesse emploie la variable $v_{kj} = v''_{kj} - v'_{kj}$ et Q_j la vitesse de la réaction j .

$$\dot{w}_k = \sum_{j=1}^M \dot{w}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M v_{kj} Q_j \quad (3.14)$$

La vitesse Q_j est dépendante de la fraction massique Y_k de l'espèce k et des constantes de réaction $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ définissant la vitesse de la réaction dans le sens direct et dans le sens inverse (Éq. 3.15). La constante $K_{f,j}$ se calcule selon la loi d'ARRHENIUS (Éq. 3.16) en utilisant le coefficient pré-exponentiel $A_{f,j}$ et l'énergie d'activation de la réaction $E_{a,j}$. $K_{r,j}$ est établie à partir de $K_{eq,j}$ (Éq. 3.17) qui est la constante d'équilibre dont l'expression est définie par K. K. KUO [59] (Éq. 3.18). Cette dernière utilise l'enthalpie ΔH_j^0 , l'entropie ΔS_j^0 de réaction et la pression ambiante P_0 .

$$Q_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{v'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{v''_{kj}} \quad (3.15)$$

$$K_{f,j} = A_{f,j} T^\beta \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{RT}\right) \quad (3.16)$$

$$K_{eq,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{r,j}} \quad (3.17)$$

$$K_{eq,j} = \left(\frac{P_0}{RT} \right)^{\sum_{k=1}^N v_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT} \right) \quad (3.18)$$

Avec la vitesse de réaction \dot{w}_k de l'espèce k calculée, il est possible de calculer le taux de dégagement de chaleur \dot{w}_T des réactions en utilisant l'enthalpie de formation massique des espèces $\Delta h_{f,k}^0$. L'expression est :

$$\dot{w}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{w}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (3.19)$$

La combustion de l'aluminium va suivre cette cinétique à l'aide des coefficients β , $A_{f,j}$ et $E_{a,j}$ établis pour chaque réaction du schéma réactionnel mis en place par L. CATOIRE. Ces différents coefficients sont illustrés dans le tableau 3.1.

TABLE 3.1 – Données sur les réactions élémentaires utilisées dans la cinétique de l'oxydation de l'aluminium avec l'air (tableau construit à partir de [33])

N°	Réactions	$A_{f,j}$ [mol.cm.s]	β [-]	$E_{a,j}/R$ [K]
1	$\text{Al}_{(g)} + \text{O}_2 = \text{AlO} + \text{O}$	9.72e14	0	80.5
2	$\text{Al}_{(g)} + \text{O} + \text{M} = \text{AlO} + \text{M}$	3.00e17	-1	0
3	$\text{AlO} + \text{O}_2 = \text{AlO}_2 + \text{O}$	4.62e14	0	10008
4	$\text{AlO}_2 = \text{AlO} + \text{O}$	10e15	0	44564
5	$\text{Al}_2\text{O} = \text{Al} + \text{AlO}$	10e15	0	67035
6	$\text{Al}_2\text{O}_2 = \text{AlO}_2 + \text{Al}_{(g)}$	10e15	0	74937
7	$\text{Al}_2\text{O}_2 = 2 \text{AlO}$	10e15	0	59336
8	$\text{Al}_2\text{O}_2 = \text{Al}_2\text{O} + \text{O}$	10e15	0	52466
9	$\text{O}_2 + \text{M} = 2\text{O} + \text{M}$	1.2e14	0	12950
10	$\text{Al}_2\text{O}_{3(g)} = \text{Al}_2\text{O}_2 + \text{O}$	3e15	0	49144
11	$\text{Al}_2\text{O}_{3(g)} = \text{AlO}_2 + \text{AlO}$	3e15	0	63915

3.2.4 Méthodes numériques

3.2.4.1 Schémas numériques

La résolution des équations de conservation est faite de manière explicite en temps et centrée en espace dans AVBP. L'avantage de ces schémas centrés est qu'ils sont peu diffusifs, mais ils sont conditionnellement stables. Ainsi ils peuvent provoquer l'apparition d'ondes parasites dans les zones de fort gradient dont l'origine est purement numérique. La précision du schéma centré a alors un coût qui est l'utilisation de la viscosité artificielle numérique pour stabiliser le calcul. Cette viscosité sera présentée plus loin dans ce chapitre. Pour l'avance en temps, elle est réalisée de manière explicite avec un schéma de Runge-Kutta à plusieurs étapes. Une condition de $C_{CFL} < 1^1$ est nécessaire pour la stabilisation de ce schéma.

Pour les études sur la post-combustion, le schéma TTG4A (Two-step Taylor-Galerkin 4A) [29] est choisi pour discrétiser les flux convectifs. Ce dernier est un schéma utilisant la méthode des éléments finis de type Galerkin en deux étapes d'ordre 4 en temps et d'ordre 3 en espace. Ce schéma a été choisi car il a l'avantage d'être stable lors de la simulation d'écoulements complexes, notamment en présence de chocs ou de forts gradients. Il est peu dissipatif et peu dispersif, mais est coûteux en termes de temps de calcul. Ainsi il permet de réaliser des simulations avec une bonne précision et une bonne robustesse.

Pour les études sur les flammes aluminium-air sans onde de choc, le schéma choisi est celui de Lax-Wendroff qui est plus dissipatif et moins coûteux en temps de calcul (2 à 3 fois moins que le TTG4A). Le choix d'utiliser un schéma plus dissipatif pour le cas qui ne contient pas d'onde de choc est lié à la combustion des particules d'aluminium. Dès le début de l'évaporation des particules, la combustion sera rapide et intense dans les flammes aluminium-air, ce qui conduira à la formation de fort gradient de température. Mais le choix de ce schéma se justifie principalement par le faible coût en temps de calculs qui nous a permis de réaliser de nombreuses simulations de flamme aluminium-air 1D et 2D.

Un opérateur de type éléments finis est utilisé pour discrétiser les flux diffusifs. Il permet d'éliminer les oscillations numériques point à point qui peuvent intervenir dans les simulations. Cette opérateur est décrit dans l'article [22]. Pour l'obtention d'informations supplémentaires sur les schémas précédemment citées, le lecteur est invité à se reporter au manuel d'AVBP [20] ou aux travaux de thèse de N. LAMARQUE [62] qui décrivent précisément les schémas numériques employés dans AVBP.

1. Ce nombre adimensionnel est intitulé du nom des mathématiciens Courant, Friedrichs et Lewy. Il représente un critère qui désigne une condition suffisante de stabilité liant les pas de temps Δt et d'espace Δx . Ce nombre s'écrit $C_{CFL} = c\Delta t/\Delta x$ avec la vitesse du son c .

3.2.4.2 Conditions aux limites

AVBP est un code permettant la propagation d'ondes acoustiques dans le domaine de calcul. Il est alors nécessaire de mettre en place des conditions limites aux bords du domaine du calcul qui traitent ces ondes de la façon la plus physique possible. Si les conditions aux limites sont classiques et imposent en dur une valeur, celles-ci vont être totalement réfléchissantes vis-à-vis des ondes acoustiques. Cette réflexion peut provoquer une accumulation d'énergie acoustique dans le domaine de calcul et faire diverger la simulation.

Pour la régulation de ces ondes acoustiques, AVBP utilise des conditions aux limites NSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions) [78]. Ces conditions se basent sur la méthode des caractéristiques et les grandeurs caractéristiques de l'écoulement sont décomposées en une série d'ondes entrantes et sortantes. Le nombre d'onde issu de cette décomposition dépend du type de condition d'entrée ou de sortie et de la sonicité de l'écoulement. En sortie, les ondes sortantes sont évaluées à partir de l'écoulement avec un schéma numérique. Mais en entrée, les ondes entrantes ne peuvent pas être évaluées par l'écoulement et sont alors définies à partir d'une valeur imposée par l'utilisateur. Ainsi les ondes acoustiques sont évacuées sans être réfléchies dans le domaine de calcul.

3.2.5 Modèle d'épaississement de flamme

Pour le cas de la modélisation de la post-combustion avec AVBP, il a été expliqué dans les travaux de S. COURTIAUD [25] que la flamme est généralement trop fine pour être résolue sur les maillages utilisés, son épaisseur étant souvent inférieure à la taille des mailles. Il est admis que pour pouvoir considérer la flamme comme suffisamment résolue sur le maillage, il faut compter environs 10 points dans l'épaisseur, 7 points étant un bon compromis entre la résolution et le temps de calcul. Si le raffinement du maillage n'est pas envisageable à cause du temps de calcul, une technique couramment employée est d'épaissir artificiellement la flamme. Cette méthode, conçue pour les flammes de prémélange laminaire, permet de simuler un front de flamme avec un maillage grossier et de conserver sa vitesse de flamme en sacrifiant la précision sur son épaisseur. Cet épaississement de flamme est illustré sur la Fig. 3.1 et décrite dans les travaux de thèse de F. SHUM-KIVAN [87].

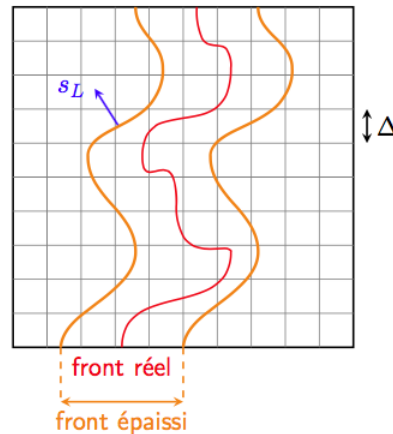


FIGURE 3.1 – Épaississement de flamme [25]

La vitesse de flamme s_L est proportionnelle à la racine carrée du produit du coefficient de diffusion thermique D_{th} et du facteur pré-exponentiel A . Elle est illustrée en Éq. 3.20. L'épaisseur du front de flamme δ_L est proportionnelle à la diffusion thermique D_{th} et l'inversement proportionnel à la vitesse de flamme s_L . Elle est illustrée en Éq. 3.21.

$$s_L \propto \sqrt{D_{th}A} \quad (3.20)$$

$$\delta_L \propto \frac{D_{th}}{s_L} \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (3.21)$$

Lorsque le coefficient de diffusion thermique est multiplié par un facteur F et le facteur pré-exponentiel est divisé par ce même facteur, la vitesse de flamme s'_L reste la même mais la flamme a une nouvelle épaisseur δ'_L qui a augmenté d'un facteur F comme l'illustre l'Éq. 3.22,

$$\delta'_L \propto \frac{D'_{th}}{s'_L} = \frac{D_{th}F}{s_L} \quad (3.22)$$

avec $D'_{th} = D_{th}F$, $A' = A/F$ et $s'_L = s_L$.

3.2.6 Viscosité artificielle

Comme il a été précisé précédemment, le schéma centré est conditionnellement stable et provoque l'apparition d'ondes parasites d'origine purement numérique dans les zones de fort gradient. Ainsi de la viscosité artificielle est ajoutée aux endroits idoines afin de stabiliser le calcul. Elles peuvent être de deux types : d'ordre 2 ou/et d'ordre 4. Celle d'ordre 2 permet de lisser uniquement les forts gradients à partir de capteurs. La viscosité artificielle d'ordre 4 agit directement sur les oscillations nœud-à-nœud sur l'ensemble du domaine de calcul.

Notre étude emploiera une viscosité artificielle basée sur les capteurs de Colin et développée pour les flux réactifs. Uniquement pour les travaux sur les flammes aluminium-air, une viscosité artificielle particulière sera employée pour initialiser l'étude d'une flamme 2D avec AVBP. Cette viscosité artificielle n'utilise pas de capteur et s'applique dans l'ensemble du domaine de calcul. Ainsi elle aura pour effet de rendre la diffusion très forte et l'écoulement sera très visqueux.

3.3 Modélisation de la phase dispersée

Cette section développe le formalisme lagrangien présent dans AVBP et mis en place par M. GARCIA [37]. Ce formalisme est celui utilisé dans ses travaux de thèse pour représenter la phase dispersée des particules d'aluminium. Il se différencie du formalisme eulérien par le calcul de la trajectoire de chaque particule à l'aide d'un bilan des forces et ne considère pas la phase dispersée comme un fluide continu.

3.3.1 Formalisme lagrangien

Le formalisme lagrangien peut suivre deux approches, dont l'une est déterministe et l'autre est stochastique. L'approche déterministe [15, 69, 96] va représenter chaque particule réelle. Elle peut être résumée par une représentation directe de la phase dispersée. Mais cette approche conduit à un suivi d'un grand nombre de particules ce qui se traduit par un coût de calcul très élevé. La seconde approche, qui est l'approche stochastique [13, 34, 88], permet de réaliser une description statistique de la phase dispersée à partir d'un nombre réduit de particules statistiques. Contrairement à la première approche, elle est moins coûteuse, mais nécessite la construction de modèles de fermeture stochastiques précis.

Dans AVBP, l'approche lagrangienne employée regroupe les deux approches précédemment citées. Elle va réduire le nombre de particules calculées tout en restant dans une approche déterministe. Pour cela, des particules virtuelles ayant des caractéristiques communes sont regroupées dans une seule particule suivie numériquement. Prenons l'exemple d'une maille qui devrait contenir 10000 particules réelles identiques en espèces, en température et en taille, cette approche hybride va nous permettre de suivre seulement 5 particules suivies, si chacune regroupe 2000 particules virtuelles, au lieu de suivre la totalité. Ainsi cette approche réduit

forcément le coût de calcul, mais peut introduire un écart à l'approche déterministe de référence si le nombre de particules suivies est trop faible pour représenter la statistique de la phase dispersée.

Dans le domaine de calcul, chaque particule virtuelle est considérée comme un point matériel se déplaçant dans l'espace et interagissant avec le gaz. Ceci n'est valable que si les hypothèses suivantes sont vérifiées :

- les gouttes sont considérées sphériques par leurs forces de tension de surface prépondérantes ;
- les collisions entre les particules sont négligées car la phase lagrangienne est supposée diluée. On considère que la fraction volumique des particules dans le gaz est inférieure à 10^{-4} .

L'interaction entre la phase dispersée et la phase gazeuse se résume à l'utilisation des termes sources S_*^l dans les équations de conservation de la phase gazeuse présentées précédemment, pour la masse, la quantité de mouvement et l'énergie. La modélisation de ces termes sources est précisée dans cette section.

3.3.2 Système d'équations du formalisme lagrangien

le système d'équations suivant décrit la trajectoire, la masse et la température de chaque particule au cours du temps :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_p^i}{dt} = u_p^i \\ \frac{dm_p u_p^i}{dt} = F_p^{ext,i} \\ \frac{dm_p}{dt} = \dot{m}_p \\ \frac{dm_p h_{s,p}}{dt} = \dot{\Phi}_p \end{array} \right. \quad (3.23)$$

L'indice p désigne une quantité particulière et i la direction spatiale. Les grandeurs X , u , m et h_s représentent respectivement la position de la particule, sa vitesse, sa masse et son enthalpie sensible. Les termes source F_p^{ext} , \dot{m} et $\dot{\Phi}$ correspondent respectivement aux forces extérieures agissant sur la particule, à la variation de masse et à celle de l'énergie interne et sont explicités dans les sections 3.3.5 et 3.3.6.

3.3.3 Interaction entre phases porteuse et dispersée

Le couplage de la phase dispersée avec la phase gazeuse est fait par le biais des termes source S_*^l définis par les Éqs. 3.24a, 3.24b et 3.24c avec N le nombre total de particules situées dans un volume de contrôle ΔV . Il est obtenu en transférant de manière conservative les flux de masse \dot{m}_p^n , de quantité de mouvement $F_p^{ext,n}$ et d'énergie $\dot{\Pi}_p^n$ de chaque particule.

$$S_m^l = \frac{1}{\Delta V} \left[\sum_{n=1}^N -\Psi(X_p^n) \dot{m}_p^n \right] \quad (3.24a)$$

$$S_{qdm,i}^l = \frac{1}{\Delta V} \left[\sum_{n=1}^N \Psi(X_p^n) (-F_p^{ext,n} + \dot{m}_p^n u_p^n) \right] \quad (3.24b)$$

$$S_E^l = \frac{1}{\Delta V} \left[\sum_{n=1}^N \Psi(X_p^n) (-\vec{F}_p^{ext,n} u_p^n + \frac{1}{2} \dot{m}_p^n \|\vec{u}_p^n\|^2 - \dot{\Pi}_p^n) \right] \quad (3.24c)$$

L'interpolation des termes source de la phase liquide vers la phase gazeuse se fait avec une fonction d'interpolation $\Psi(X_p)$. Cette fonction d'interpolation est définie par l'Éq. 3.25 pour les maillages non structurés avec j l'indice du sommet de l'élément et N_v le nombre de sommets. Elle est effectuée avec les sommets de l'élément de maillage qui contient la goutte, et des poids inversement proportionnels à la distance entre la goutte et les sommets de l'élément d_j . Une représentation de la projection des termes source sur les sommets d'un maillage carré est illustré en Fig. 3.2.

$$\Psi_j(X_p) = \frac{1/d_j}{\sum_{k'=1}^{N_v} 1/d_{k'}} \quad (3.25)$$

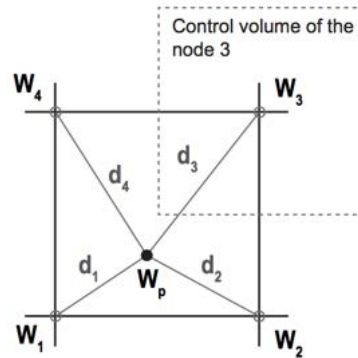


FIGURE 3.2 – Exemple de projection des termes source issus d'une goutte sur les sommets d'un élément carré (figure extraite de [20])

Le volume de contrôle ΔV est égal au volume nodal, c'est-à-dire au volume entourant un sommet, défini à partir des centres des cellules associées à ce sommet, tel que cela est montré en Fig. 3.3.

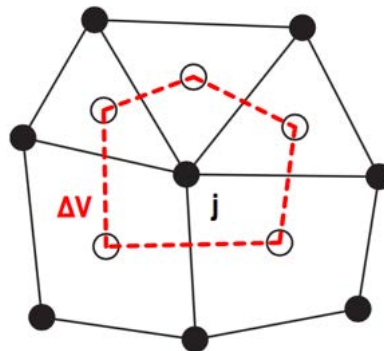


FIGURE 3.3 – Volume de contrôle associé au nœud j (figure extraite de [20])

La modélisation du flux de masse \dot{m}_p^n et d'énergie Π_p^n sera définie par les modèles d'évaporation et de condensation utilisés dans ces travaux et présentés dans la section 3.3.6. La combustion de l'aluminium est uniquement gazeuse et n'interviendra pas dans le flux d'énergie. La modélisation du flux de quantité de mouvement va suivre la dynamique d'une particule isolée qui va être définie dans la section suivante.

3.3.4 Dynamique d'une particule isolée

La dynamique d'une particule tient compte de toutes les forces extérieures. L'équation de mouvement qui en résulte est appelée l'équation de Basset-Boussinesq-Oseen (BBO). Les auteurs qui ont contribué à sa mise en place sont BASSET, BOUSSINESQ et OSEEN [7, 16, 75]. Ils ont étudié l'écoulement autour d'une goutte en chute libre et ont pu en dériver une expression analytique pour les forces s'exerçant sur la goutte. Cette étude a été approfondi par TCHEN [92] pour une sphère rigide dans un écoulement complexe. Par la suite, MAXEY et RILEY [70] ont corrigé quelques incohérences.

L'ensemble des forces extérieures \vec{F}^{ext} qui s'exercent sur une goutte en mouvement sont [37] :

- le poids de la particule \vec{F}_p ,
- la force de traînée \vec{F}_D ,
- la force de masse ajoutée \vec{F}_{am} ,
- le gradient de pression \vec{F}_{press} ,
- la force de Basset \vec{F}_B .

Une précision est apportée sur les forces de masse ajoutée et de Basset qui sont moins connues que les autres forces extérieures. La force de masse ajoutée est la force liée à l'inertie du fluide en situation instationnaire. Lorsque la particule se déplace, elle met en mouvement un certain volume de fluide. La force de Basset est la force liée à l'historique des accélérations passées de la particule.

Une simplification peut être apporté sur l'utilisation de ces forces extérieures. Si la masse volumique des particules est très supérieure à celle du gaz, comme c'est le cas de l'aluminium liquide par rapport aux gaz comme l'air ou les produits de détonation, on ne considère que la force de traînée [27]. L'ensemble des forces extérieures sur la goutte peut alors être résumé à $\vec{F}^{ext} = \vec{F}_D$ dans notre étude.

3.3.5 Force de traînée

La force de traînée \vec{F}_D s'exprime avec un coefficient de traînée C_D par la relation (3.26) :

$$\vec{F}_D = \frac{1}{2} \rho_g C_D A_p \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\| (\vec{u}_g - \vec{u}_p) \quad (3.26)$$

où ρ_g est la masse volumique du fluide, \vec{u}_g sa vitesse et \vec{u}_p la vitesse de la particule. A_p correspond à la section de la particule.

De nombreux modèles de traînée peuvent être trouvés dans la littérature. Leur domaine de validité est donné en fonction des paramètres qui adimensionnent la dynamique de la particule et ses transferts, tels que :

- le nombre de Reynolds particulaire Re_p :
il caractérise le rapport entre les forces inertielles et visqueuses. Il est défini par l'équation 3.27 à partir du diamètre de particule D_p

$$Re_p = \frac{\rho_g \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\| D_p}{\mu_g}; \quad (3.27)$$

- le nombre de MACH particulaire M_p :
ce nombre exprime le rapport entre la vitesse locale de la particule et la vitesse du son dans le fluide. Il est défini par la relation (3.28)

$$M_p = \frac{\|\vec{u}_g - \vec{u}_p\|}{c}; \quad (3.28)$$

- le nombre de Strouhal St_p :
ce nombre caractérise le comportement instationnaire d'un écoulement autour d'une particule. Il est donné par l'Éq. 3.29 qui compare le temps de convection au temps d'instationnarité

$$St_p = \frac{D_p}{\tau_{inst} \|\vec{u}_g - \vec{u}_p\|}; \quad (3.29)$$

si $Re.St_p \ll 1$: l'écoulement est considéré comme stationnaire autour de la particule ;

— le nombre de Stokes St_{k_p} :

ce nombre caractérise le comportement dynamique de la particule par rapport à la phase qui la porte. Il est donné par l'Éq. 3.30 qui est le rapport entre le temps caractéristique du comportement inertiel de la particule et celui de l'écoulement

$$St_{k_p} = \frac{\tau_p}{\tau_f}; \quad (3.30)$$

si $St_{k_p} \ll 1$: la particule suit les lignes de courant de l'écoulement ;

si $St_{k_p} \gg 1$: le déplacement de la particule est dominé par son inertie ;

— le nombre de Knudsen Kn :

ce nombre caractérise le régime d'écoulement qui règne autour de la particule. Il est donné par l'équation 3.31 et il est défini comme le rapport entre le libre parcours moléculaire dans la phase porteuse et la dimension de la particule.

$$Kn = \frac{\lambda}{D_p} = \sqrt{\frac{\gamma\pi}{2}} \frac{M_p}{Re_p} \quad (3.31)$$

Ainsi en fonction de ce nombre, il est possible de poser une hypothèse sur le régime de l'écoulement tel qu'il est illustré dans le tableau 3.2.

TABLE 3.2 – Régime de l'écoulement autour de la particule selon le nombre de Knudsen [27].

Régime	Nombre de Knudsen
Continu	$Kn < 10^{-3}$
De glissement	$10^{-3} < Kn < 0,25$
De transition	$0,25 < Kn < 10$
Moléculaire libre	$Kn > 10$

Les régimes présentés dans le tableau sont des régimes d'écoulement et une définition est donnée dans le mémoire de C. DEVALS [27]. Ces définitions sont rappelées ici :

- Le régime moléculaire libre est le régime de la raréfaction extrême. Le libre parcours moléculaire étant plusieurs fois la dimension caractéristique de la particule, les molécules qui heurtent la surface sont alors réfléchies. Elles voyageront en moyenne assez loin avant d'entrer en collision avec d'autres molécules. L'écoulement n'est donc pas perturbé par la particule.
- Le régime de glissement est le régime de légère raréfaction. L'écoulement est perturbé par la présence de la particule. Une couche limite se développera mais au lieu d'avoir une vitesse nulle à la paroi, il y aura une vitesse tangentielle finie. C'est la vitesse de glissement.
- Dans la zone de transition entre le régime de glissement et le régime moléculaire libre, le libre parcours moyen est de l'ordre de la dimension du corps. Les collisions des molécules du gaz avec la surface et les collisions intermoléculaires sont d'égale importance et l'analyse en devient très compliquée. Une interpolation doit être réalisée entre les régimes de glissement et le régime moléculaire libre.

Pour les domaines liés à la phase post-détonation ou aux moteurs à propergol solide, les modèles suivants sont couramment employés. Leurs conditions d'emploi sont rappelées.

La corrélation de Schiller et Naumann

La loi de Schiller et Naumann est très largement utilisée, surtout dans les calculs diphasiques en chambre de combustion [31]. Mais il faut noter que son domaine d'application se limite aux écoulements stationnaires, incompressibles et uniformes pour des nombres de MACH particulaire inférieurs à 0,1

$$C_d = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re_p^{0,687}) \text{ pour } Re_p < 1000;$$

$$C_d = 0,437 \text{ pour } Re_p > 1000.$$

La corrélation de Igra

La corrélation de IGRA et TAKAYAMA est intéressante car elle a été déterminée à partir d'expériences en tube à choc [53]. Or la présence du choc dans l'expérience rapproche les conditions de celles-ci du passage du choc secondaire dans la boule de feu durant la post-combustion. Les conditions d'utilisation de ce modèle se placent dans une gamme de Reynolds comprise entre 200 et 100 000 avec un MACH particulaire supérieur à 1,0. Dans notre cas d'application de la post-combustion, les particules peuvent être à des Reynolds supérieurs à 1000 pour des phases telles que l'expansion, mais peuvent aussi être à des Reynolds inférieurs à 200 pour des phases telles que la phase de mélange asymptotique.

$$\log C_d = 6,1946 - 4,4990 \log Re_p + 1,0849 (\log Re_p)^2 - 0,0886 (\log Re_p)^3$$

La corrélation de Henderson

Henderson [49] a établi une corrélation prenant en compte les régimes continus, de glissement, de transition et d'écoulement moléculaire libre pour un nombre de MACH particulaire allant jusqu'à 6 et des Reynolds allant jusqu'à la transition laminaire-turbulente. Il prend aussi en compte la différence de température entre la particule et le gaz porteur. Il décrit tous ces régimes à l'aide de deux équations :

une en subsonique :

$$C_d = 24 \left[Re_p + S \left(4,33 + \frac{3,65 - 1,53 \frac{T_p}{T_g}}{1 + 0,353 \frac{T_p}{T_g}} \exp\left(-0,247 \frac{Re_p}{S}\right) \right) \right]^{-1} \\ + \exp\left(-\frac{0,5M_p}{\sqrt{Re_p}}\right) \left[\frac{4,5 + 0,38(0,03Re_p + 0,48\sqrt{Re_p})}{1 + 0,03Re_p + 0,48\sqrt{Re_p}} + 0,1M_p^2 + 0,2M_p^8 \right] \\ + \left[1 - \exp\left(-\frac{M_p}{Re_p}\right) \right] 0,6S$$

l'autre en supersonique :

$$C_d = \frac{0,9 + \frac{0,34}{M_p^2} + 1,86 \left(\frac{M_p}{Re_p}\right)^{\frac{1}{2}} \left[2 + \frac{2}{S^2} + \frac{1,058}{S} \left(\frac{T_p}{T_g}\right)^{\frac{1}{2}} - \frac{1}{S^4} \right]}{1 + 1,86 \left(\frac{M}{Re}\right)^{\frac{1}{2}}};$$

et il les relie par une interpolation linéaire :

$$C_d = C_d(1,0; Re_p) + \frac{4}{3} (M_p - 1,0) [C_d(1,75; Re_p) - C_d(1,0; Re_p)]$$

$$\text{avec : } S = M_p \sqrt{\gamma/2}.$$

L'évolution du coefficient C_d donnée par chaque modèle est présentée sur la Fig. 3.4 avec en abscisse le nombre de REYNOLDS de la particule et en ordonnée le coefficient C_d . Les modèles de SCHILLER et NAUMANN et de HENDERSON calculent des coefficients C_d très proches les uns des autres pour $Re_p > 10$ et $M_p < 0,8$. Mais pour des $Re_p > 200$ et $M_p > 1,0$, les résultats des modèles de HENDERSON et IGRA donnent des coefficients C_d plus important que ceux calculés par SCHILLER et NAUMANN. Cette observation est logique puisque le modèle de SCHILLER et NAUMANN ne prend pas en compte le nombre de MACH particulaire dans son équation. Mais du fait de son expression simple, de ses résultats cohérents avec les autres modèles pour $Re_p > 10$ et $M_p < 0,8$, il représente un bon candidat pour notre étude. Le seul problème qui pourrait apparaître est celui du nombre de MACH des particules pour le cas de la post-combustion. Nous verrons que cette valeur ne limitera notre modèle que pendant les premiers instants de la phase d'expansion de la boule de feu. Pendant un très court instant, qui de l'ordre de la microseconde, M_p sera supérieur à 1 pour ensuite retrouver une valeur acceptable pour le modèle. Ainsi cette durée d'exposition de la particule à $M_p > 1$ est trop courte pour réellement influencer la dynamique des particules durant la post-combustion, ce qui nous permet d'utiliser le modèle simple de SCHILLER et NAUMANN.

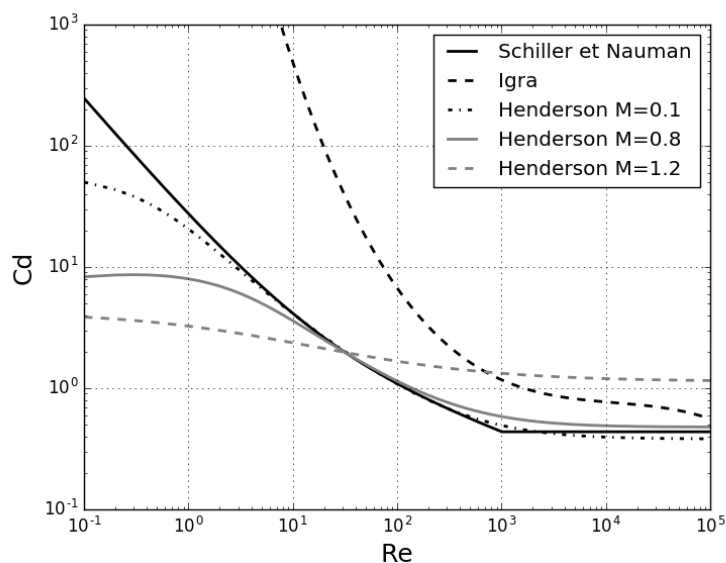


FIGURE 3.4 – Coefficient de trainée en fonction du nombre de Reynolds pour différents modèles

3.3.6 Évaporation d'une goutte

L'évaporation d'une goutte va intervenir sur les sources de transfert entre les phases liquide et gazeuse. La modélisation de l'évaporation choisie dans ces travaux est celle de SPALDING. Ce modèle est implanté dans AVBP et il est expliqué dans ce rapport en utilisant le développement fait dans la thèse de D. PAULHIAC qui a modélisé la combustion de sprays dans les brûleurs aéronautiques [77]. L'emploi de ce modèle doit suivre les hypothèses suivantes :

Hypothèse 1 :

L'interaction avec les gouttes voisines peut être négligée. La goutte est considérée comme sphérique et isolée.

Hypothèse 2 :

La température à l'intérieur de la goutte est uniforme. Cette hypothèse est basée sur le fait que la conductivité du liquide est d'un ordre de grandeur supérieure à celle du gaz. Le temps mis en jeu pour homogénéiser la température au sein de la goutte est plus faible que celui de l'adaptation thermique gazeuse. Ainsi la conductivité thermique de la goutte peut être considérée comme infinie et cela nous évite une résolution de l'écoulement interne de la goutte en effectuant un bilan thermique à travers sa surface.

Hypothèse 3 :

L'environnement du gaz et de la goutte sont considérés au repos. L'évolution de la phase gazeuse est supposée *quasi*-statique, c'est-à-dire présentant une succession d'états d'équilibre. Cette forte hypothèse se justifie par le fait que la masse volumique du liquide est plus grande que celle du gaz. Ainsi la variation thermique du gaz environnant évolue plus rapidement que celle du liquide et la vitesse du flux de vapeur qui s'échappe de la surface est plus grande que la vitesse de régression de la surface de la goutte. La position de la surface de la goutte peut être considérée comme statique à un instant donné. Les équations de la phase gazeuse se réduisent à un équilibre convecto-diffusif gazeux. Un bilan massique et thermique de la goutte permet d'obtenir l'évolution temporelle des caractéristiques de la goutte.

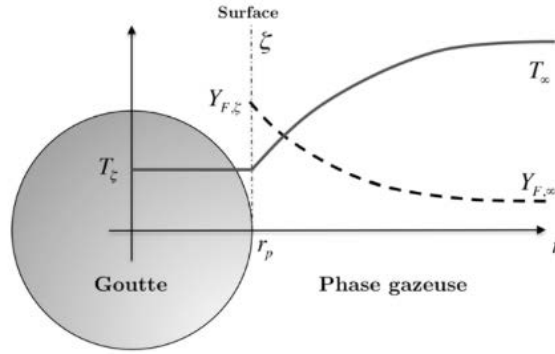


FIGURE 3.5 – Profil radial de la température T et de la fraction massique de carburant gazeux Y_F pour une goutte sphérique à température uniforme $T_P = T_\xi$ (figure extraite de [77])

À partir de ces hypothèses, les équations de conservation de la phase gazeuse sont traitées en coordonnées sphériques et sous la forme statique (Fig. 3.5). La seule variable intervenant dans ces équations est la coordonnée radiale. Ainsi les équations de conservation de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie de la phase gazeuse écrivent entre la surface de la goutte (notée ξ) et le champ lointain (noté ∞) :

$$\rho u r^2 = C^{\text{st}} = \frac{\dot{m}_F}{4\pi}, \quad (3.32a)$$

$$\rho u r^2 \frac{dY_F}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 [\rho D_F] \frac{dY_F}{dr} \right), \quad (3.32b)$$

$$\rho u r^2 \frac{dC_p T}{dr} = \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{\lambda}{C_p} \frac{dC_p T}{dr} \right), \quad (3.32c)$$

où r désigne la coordonnée radiale, \dot{m}_F le flux de vapeur de l'espèce liquide à la surface, Y_F à sa fraction massique, D_k sa diffusivité, λ la diffusivité thermique et C_p la capacité calorifique à pression constante du mélange. Ces équations font intervenir les quantités ρD_F et λ/C_p mais elles sont supposées indépendantes de la variable r , donc indépendantes de la température et du mélange local. Ces quantités sont évaluées en champs lointain. Malgré la sensibilité de ces quantités sur le résultat, cette approximation est nécessaire pour la dérivabilité des expressions et introduit une faible erreur.

L'intégration du modèle d'évaporation se déroule en deux étapes. La première étape est l'évolution temporelle de la masse de la goutte. La seconde étape est l'évolution temporelle de la température de la goutte qui est faite avec un bilan d'énergie utilisant le débit de masse évaporé précédemment obtenu. Ces étapes sont développées dans les sections 3.3.6.1 et 3.3.6.2. La section 3.3.6.3 reviendra sur l'hypothèse 3 qui est trop contraignante par la présence d'un écoulement autour de la particule pour la majorité des cas. Dans cette section, une amélioration du modèle d'évaporation sera proposée en prenant en compte l'écoulement du gaz environnant. Lors de l'évaporation totale de la goutte, la dernière itération d'évaporation de la goutte doit être spécifique et sera développée dans la section 3.3.6.4.

3.3.6.1 Évolution de la masse de la goutte

L'évaporation de la goutte conduit à une perte de masse au niveau de sa surface vers la phase gazeuse. Ainsi, comme l'interface liquide/gaz ne stocke pas de matière, cette perte de masse est égale au flux de vapeur de l'espèce liquide et se résume par la relation $\dot{m}_F = -\dot{m}_p$, où \dot{m}_p est la variation de la masse de la goutte (ou taux d'évaporation). En effectuant deux fois l'intégration de l'Éq. 3.32b entre la surface de la goutte et le champ lointain, une expression du taux d'évaporation peut être obtenue :

$$\dot{m}_p = -2\pi d_p [\rho D_F] \ln(B_M + 1) \quad \text{avec} \quad B_M = \frac{Y_{F,\xi} - Y_{F,\infty}}{1 - Y_{F,\xi}} \quad (3.33)$$

Le nombre de Spalding de transfert de masse B_M intervient dans l'équation. Il met en évidence que le taux d'évaporation est défini par les conditions en surface de la goutte et à l'infinie. Contrairement aux conditions en surface, les conditions en champ lointain sont connues par définition. Un calcul simple est fait pour déterminer la valeur de la fraction massique de l'espèce liquide à la surface de la goutte $Y_{F,\xi}$. En supposant que l'interface est en équilibre thermodynamique, il est possible d'utiliser la relation de CLAUSIUS-CLAPEYRON pour obtenir la pression partielle de l'espèce liquide à la surface de la goutte. Ce paramètre permettra à son tour d'obtenir la fraction massique $Y_{F,\xi}$ à partir de la pression de mélange. Ainsi l'Éq. 3.33 montre une dépendance à la température de la particule, en plus de sa dépendance au diamètre de la goutte d_p . L'obtention du taux d'évaporation nous permet de calculer l'évolution temporelle de la température de la goutte.

3.3.6.2 Évolution de la température de la goutte

Le bilan d'enthalpie appliqué à la goutte permet d'obtenir l'évolution de la température de la goutte qui prend l'expression suivante :

$$\frac{d}{dt}(m_p h_{s,l}(T_p)) = \Phi_l^c + \Phi_l^{cv} = \dot{\Pi}_p^n \quad (3.34)$$

où Φ_l^{cv} et Φ_l^c sont respectivement les flux conductif et convectif (lié au débit de masse évaporée) à la surface de la goutte, et $h_{s,l}$ est l'enthalpie sensible de la goutte.

Un bilan des flux est effectué à la surface de la goutte pour définir les expressions des flux. Tout comme pour la masse, l'interface ne stocke pas d'énergie. Ainsi un équilibre s'établit à la surface de la goutte entre le flux d'énergie entrant dans la particule $\dot{\Pi}_p^n$ et celui entrant dans la phase gazeuse $\dot{\Pi}_g^n$:

$$\dot{\Pi}_p^n = -\dot{\Pi}_g^n = -\Phi_g^{cv} - \Phi_g^c \quad (3.35)$$

$$\Phi_l^{cv} + \Phi_l^c + \Phi_g^{cv} + \Phi_g^c = 0 \quad (3.36)$$

Les flux convectifs Φ_*^{cv} correspondent au transfert d'enthalpie lié au changement de phase en utilisant l'enthalpie sensible du gaz $h_{s,g}$ et la température du gaz en surface de la particule T_ξ pour une particule à température T_p . Elles s'écrivent :

$$\Phi_g^{cv} = \dot{m}_F h_{s,g}(T_\xi) \quad (3.37a)$$

$$\Phi_l^{cv} = \dot{m}_p h_{s,l}(T_p) \quad (3.37b)$$

L'introduction de la chaleur latente d'évaporation L_v , de la continuité de la température à la surface $T_\xi = T_p$ et de la conservation de la masse $\dot{m}_p = -\dot{m}_F$ permet d'écrire la relation suivante :

$$\Phi_l^{cv} + \Phi_g^{cv} = \dot{m}_p L_v(T_p) \quad (3.38)$$

où $L_v(T_p) = h_{s,g}(T_p) - h_{s,l}(T_p)$. Le flux conductif gazeux Φ_g^c à la surface de la goutte s'écrit par définition d'après l'Éq. 3.32c :

$$\Phi_g^c = \left(4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_p} \frac{dC_p T}{dr} \right) |_{\xi+} \quad (3.39)$$

Le flux conductif liquide Φ_l^c est indéfini à l'interface car la conductivité thermique est considérée infinie et la température du liquide constante. Cependant, il est possible d'en estimer la valeur grâce à l'Éq. 3.36 :

$$\Phi_l^c = -\Phi_g^c + \dot{m}_p L_v(T_\xi) \quad (3.40)$$

L'évolution de la température de la goutte est obtenue en séparant les variables dans l'Éq. 3.34 et en utilisant les Éq. 3.37b et 3.40, pour obtenir :

$$\frac{d}{dt}(m_p h_{s,l}(T_p)) = \dot{m}_p h_{s,l}(T_p) + m_p \frac{dh_{s,l}(T_p)}{dt} \quad (3.41)$$

$$\frac{dC_{p,l}T_p}{dt} = \frac{\Phi_l^c}{m_p} \quad (3.42)$$

$$\frac{dC_{p,l}T_p}{dt} = \frac{1}{m_p}(-\Phi_g^c + \dot{m}_p L_v(T_p)) \quad (3.43)$$

Ensuite pour décrire le flux conductif gazeux Φ_g^c donné par l'Éq. 3.39, on définit la variation radiale de la température du gaz par l'intégration de l'équation d'énergie 3.32c. Une première intégration de Éq. 3.32c en prenant en compte la condition limite à la surface fournit la relation suivante :

$$\dot{m}_F(C_P(T)T - C_P(T_\xi)T_\xi) = 4\pi r^2 \frac{\lambda}{C_{P,l}} \left[\frac{dC_P T}{dr} \right] - 4\pi r_\xi^2 \frac{\lambda}{C_{P,l}} \left[\frac{dC_P T}{dr} \right]_\xi \quad (3.44)$$

où $r_\xi = r_p$. Le terme de droite correspond justement à l'inconnue Φ_g^c (voir l'Éq. 3.39). On intègre une seconde fois avec application de la condition à la limite en champ lointain qui permet d'obtenir la relation en Éq. 3.47 en passant par les relations Éq. 3.45 et Éq. 3.46 :

$$\dot{m}_F \left(C_P T - C_P T_\xi - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_F} \right) = 4\pi r^2 \lambda \frac{dT}{dr} \quad (3.45)$$

$$-\frac{1}{r} = \frac{4\pi\lambda}{\dot{m}_F C_P} \ln \left(T - T_\xi - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_F C_P} \right) - \frac{4\pi\lambda}{\dot{m}_F C_P} \ln \left(T_\infty - T_\xi - \frac{\Phi_g^c}{\dot{m}_F C_P} \right) \quad (3.46)$$

$$\dot{m}_F = 4\pi r_p \frac{\lambda}{C_P} \ln(B_T + 1) \quad (3.47)$$

où B_T est le nombre de SPALDING de transfert de chaleur et est défini par l'expression suivante :

$$B_T = \frac{(C_P(T_\infty)T_\infty - C_P(T_\xi)T_\xi)\dot{m}_F}{-\Phi_g^c} \quad (3.48)$$

Une relation peut être définie entre B_M et B_T (Éq. 3.33 et Éq. 3.48) à partir de $\dot{m}_F = -\dot{m}_p$ et permet d'obtenir la relation :

$$B_T = (1 + B_M)^{\frac{1}{Le_F}} - 1 \quad (3.49)$$

où le nombre de Lewis $Le_F = \lambda/(C_P \rho D_F)$ compare la diffusion de l'espèce liquide et la diffusion thermique. L'utilisation des Éqs. 3.47 et 3.48 permet d'obtenir Φ_g^c en fonction des grandeurs connues à la surface et en champ lointain :

$$\Phi_g^c = -2\pi d_p \frac{\lambda}{C_P} (C_P(T_\infty)T_\infty - C_P(T_\xi)T_\xi) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T} \quad (3.50)$$

Ainsi, en introduisant l'Éq. 3.50 dans Éq. 3.43, on obtient l'expression de l'évolution temporelle de la goutte :

$$C_{P,l} \frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_p} (\dot{m}_p L_v(T_p) - 4\pi r_p \frac{\lambda}{C_{P,l}} (C_P(T_p)T_p - C_P(T_\infty)T_\infty) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T}) \quad (3.51)$$

À partir du modèle de Spalding, l'évolution temporelle d'une goutte est obtenue avec l'intégration temporelle simultanée des Éqs. 3.51 et 3.43. Les conditions initiales à définir sont une température et le diamètre de la goutte. On retrouve ainsi une particule qui va perdre de la masse au cours du temps et avoir une température qui va tendre vers la température du mélange gazeux. Mais un cas particulier peut apparaître si la température de la goutte atteint un équilibre. Cet équilibre est possible lorsque le flux de chaleur sortant de la phase gazeuse vers la phase liquide est égal à l'énergie nécessaire pour l'évaporation. Cette température

d'équilibre est appelée température « humide ». Le préchauffage de la goutte étant fini, ainsi la température ne varie plus et l'Éq. 3.43 implique que $\Phi_g^c = \dot{m}_p L_v(T_p)$. Lorsque cet état est atteint, B_T , B_M et donc \dot{m}_p sont constants, ce qui implique une variation linéaire du carré du diamètre de la goutte, pour retrouver la loi du d^2 .

3.3.6.3 Prise en compte de l'écoulement autour de la particule

L'hypothèse 3 qui suppose que l'écoulement autour de la particule était au repos limite grandement l'utilisation du modèle. Des modifications ont alors été apportées pour prendre en compte cet écoulement sur le taux d'évaporation et sur les flux d'énergie. Au niveau de la goutte, la présence de cet écoulement relatif provoque deux modifications principales par rapport au cas au repos :

- l'écoulement du gaz à la surface de la goutte provoque un cisaillement à la surface de la goutte. Cet effet en surface provoque la mise en mouvement du liquide à l'intérieur de la goutte qui a tendance à homogénéiser la température de la goutte ;
- un écoulement relatif non nul autour de la goutte fait introduire un nombre de Reynolds particulaire (Éq. 3.27) non nul. Il se forme alors une couche limite autour de la goutte qui peut avoir une forme plus ou moins complexe selon la valeur du Re_p . Avec l'apparition de la couche limite, on introduit aussi la turbulence, la présence de décrochage/ré-accrochage de l'écoulement etc. Ainsi elle aura une influence sur l'évaporation en augmentant les transferts de masse et de chaleur par rapport au cas au repos.

De manière générale, le taux d'évaporation augmente avec l'intensité de la vitesse relative de la goutte par rapport à l'écoulement, et donc avec Re_p . L'approche la plus couramment utilisée est celle où les nombres de SHERWOOD et de NUSSELT, qui dépendent de Re_p , sont introduits dans les taux d'évaporation et de transfert de chaleur obtenus au repos.

$$Sh = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} / 2 (S_c^F)^{1/3} \quad (3.52a)$$

$$Nu = 2 + 0.55 Re_p^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.52b)$$

RANZ et MARSHALL [81] ont proposé une correction en utilisant les Éqs. 3.33 et 3.50 et en les modifiant pour obtenir les expressions suivantes :

$$\dot{m}_p = -Sh \pi d_p [\rho D_F] \ln(B_M + 1) \quad (3.53a)$$

$$B_T = (1 + B_M)^{\frac{Sh}{Nu Le_F}} - 1 \quad (3.53b)$$

$$\Phi_g^c = Nu \pi d_p \frac{\lambda}{C_{P,l}} (C_P(T_\xi) T_\xi - C_P(T_\infty) T_\infty) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T}. \quad (3.53c)$$

3.3.6.4 Fin de l'évaporation

À l'approche de la fin de l'évaporation de la goutte, sa faible masse peut poser un problème lors du calcul de la nouvelle masse si $m_p + \dot{m}_p \Delta t < 0$. Dans ce cas, la masse ne se conserve plus et il est nécessaire d'avoir une procédure permettant de fermer l'évaporation avant de supprimer la particule du domaine de calcul. Cette procédure part du principe que la masse à évaporer à la dernière itération, $\Delta m_p = \dot{m}_p \Delta t$, est la masse de la particule $\Delta m_p = m_p$. Elle définit une masse de particule limite $m_{p,limite}$, définie arbitrairement en fonction du diamètre, à partir de laquelle l'Éq. 3.43 est modifiée en l'Éq. 3.54 pour que l'évaporation de la particule puisse se fermer à $m_p = 0$.

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_{p,limite}} \left(2 - \frac{m_p}{m_{p,limite}} \right) \frac{1}{C_{P,l}} \Phi_l^c \quad \text{pour } m_p < m_{p,limite} \quad (3.54)$$

3.3.6.5 Choix des paramètres d'évaporation

La mise en place du modèle d'évaporation de Splading demande d'apporter deux paramètres nécessaires au calcul : le nombre de Prandtl Pr et le nombre de Schmidt Sc . Ces paramètres sont employés dans les calculs du coefficient B_M , du nombre de Nusselt Nu et du nombre de Sherwood Sh .

Le calcul du nombre de Prandtl se fait à partir des données sur l'aluminium gazeux présentées dans le chapitre 1 et pour une température de 3000 K se situant entre sa température d'évaporation ($T \approx 2700$ K) et la température prévue de la flamme aluminium-air ($T \approx 3300$ K) à 1 bar. La viscosité μ de l'aluminium est de $55 \text{ mg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ en utilisant une loi de puissance avec une viscosité de référence de $9,07 \text{ mg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ à 300 K. La capacité thermique C_P de l'aluminium est calculée avec le polynôme de la NASA et sa valeur est de $798,46 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ et la conductivité thermique λ du gaz est de $0,22 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$. Ainsi le nombre de Prandtl peut être calculé ci-dessous en Éq. 3.55.

$$Pr = \frac{C_P \mu}{\lambda} = 0,2 \quad (3.55)$$

Pour le calcul du nombre de Schmidt, on posera l'hypothèse que le nombre de Lewis Le est égal à 1, ce qui conduit à l'égalité $Sc = Pr$.

3.3.7 Modélisation de la condensation

Dans la littérature, l'ensemble des modèles de combustion diphasique de l'aluminium ne prend pas en compte la condensation de l'alumine. L'alumine apparaît dans les produits de combustion et reste sous forme gazeuse avec des propriétés thermodynamique qui sont celles de sa phase liquide. Mais cette démarche ne permet pas de suivre la dynamique et la croissance des résidus d'alumines dans les gaz brûlés lors de la combustion de l'aluminium. Ainsi une modélisation du phénomène de condensation est nécessaire et a été mise en place dans ces travaux de thèse. Cette condensation est basée sur le modèle de Spalding avec un débit massique \dot{m}_p positif du gaz vers le liquide. Dans ce cas, l'Éq. 3.33 admet $Y_\xi < Y_\infty$ ce qui rend le paramètre B_M négatif, ce qui conduit à un débit \dot{m}_p positif. Ce débit sera alors utilisé pour calculer la nouvelle masse m_p et son nouveau diamètre d_p .

Si le modèle de Spalding est laissé tel quel, on retrouve bien une augmentation du diamètre de la particule avec une consommation progressive de la fraction massique Y_F de l'espèce condensée. Mais une modification doit être faite sur les transferts d'énergie. La chaleur dégagée par le changement de phase L_v est fournie au gaz qui perd de la masse par condensation mais les transferts d'énergie diffusifs entre la phase gazeuse et liquide ont toujours lieu. Ainsi les équations sur l'évolution de la température de la goutte (Éq. 3.56) et sur le flux d'énergie transféré au gaz (Éq. 3.57) sont représentés ci-dessous.

$$C_{P,l} \frac{dT_p}{dt} = \frac{1}{m_p} \left(-Nu \pi d_p \frac{\lambda}{C_{p,l}} (C_p(T_\xi)T_\xi - C_P(T_\infty)T_\infty) \right) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T}. \quad (3.56)$$

$$\dot{m}_g^n = Nu \pi d_p \frac{\lambda}{C_{p,l}} (C_P(T_\xi)T_\xi - C_P(T_\infty)T_\infty) \frac{\ln(B_T + 1)}{B_T} + \dot{m}_p L_v(T_p) \quad (3.57)$$

Contrairement à l'évaporation qui est impossible lorsque la température $T_p < T_{fus}$, la condensation de l'espèce gazeuse peut se faire aussi sur une particule solide. Dans ce cas, le changement de phase de l'espèce gazeuse libère la chaleur qui correspond à la condensation et ajoute celle correspondant à la solidification. Ainsi, tout comme l'accroissement de la goutte grâce à la condensation, la particule grossit grâce à la condensation et à la solidification pour une température de particule $T_p < T_{fus}$.

3.3.8 Fusion d'un solide

Pour l'aluminium et l'alumine, les températures de fusion sont supérieures à la température ambiante et inférieures à la température de la flamme aluminium-air, ce qui implique que les phénomènes de fusion ou de solidification interviendront lors de la combustion diphasique de l'aluminium en condition ambiante. Initialement le code AVBP pouvait introduire des particules solides dans le domaine de calcul mais ne prenait pas en charge la fusion et les échanges d'énergie associés aux changements de phase. Des modifications ont alors été apportées dans la définition thermodynamique des espèces condensées. Pour s'approcher du phénomène de fusion lors du chauffage d'une particule solide, les enthalpies sensibles définies pour les espèces ont été modifiées pour prendre en compte la chaleur latente de fusion de la particule. Ainsi pour des températures $T_p < T_{fus}$, on ajoute la chaleur latente de fusion à la chaleur latente d'évaporation pour déterminer l'enthalpie sensible de la particule à cet état. La Fig. 3.6 illustre la variation de l'enthalpie sensible écrite dans AVBP à partir des fonctions f_1 et f_2 . On retrouve en ordonnée l'enthalpie sensible et en abscisse la température de l'espèce. Cette modification sur l'enthalpie sensible de l'espèce conduit à apporter davantage d'énergie à la particule pour qu'elle passe de la phase solide à la phase liquide lors de son chauffage et permet d'avoir une approche plus physique du phénomène.

$$f_1(T) = H_{s,g} - \Delta H_{vap} - C_{P,l}(T_{vap} - T_{liq}) - \Delta H_{fus} - C_{P,s}(T_{fus} - T) \quad (3.58a)$$

$$f_2(T) = H_{s,g} - \Delta H_{vap} - C_{P,l}(T_{vap} - T) \quad (3.58b)$$

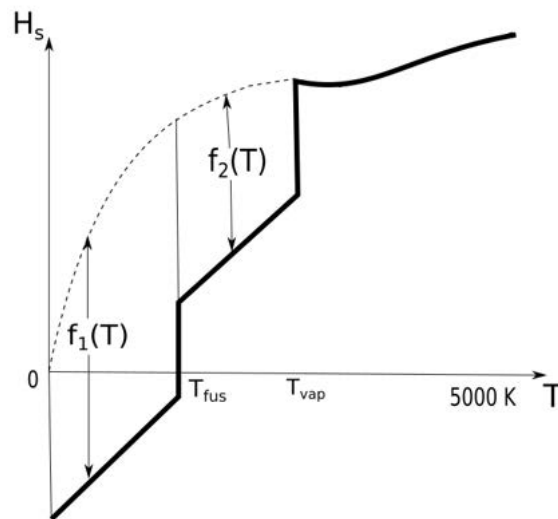


FIGURE 3.6 – Évolution de l'enthalpie sensible en fonction de la température selon les différentes phases (en trait plein) superposé avec l'enthalpie sensible pour la phase gazeuse uniquement (trait en pointillé)

3.3.9 Rayonnement

Une flamme d'aluminium a une température qui avoisine les 3300 K et celle-ci contient des particules d'alumine dans ses produits de combustion. Or ces particules ont une température d'évaporation avoisinant les 3800 K ce qui les maintient sous forme de gouttes très chaudes derrière la flamme et conduit à prendre en compte un autre transfert d'énergie : le rayonnement des particules d'alumine chaudes sur la phase gazeuse. Dans cette analyse, l'alumine liquide est considérée comme un corps gris d'émissivité $\epsilon_p = \alpha_p = 0,8$ [101] qui rayonne vers un domaine infiniment loin à $T_\infty = 300$ K entourant la goutte. Le flux thermique surfacique sortant de la goutte est décrit en Éq. 3.59 avec la constante de Stefan-Boltzmann $\sigma = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$. Ce flux thermique est une perte d'énergie du système et n'interagit pas avec les phases gazeuses.

$$\Phi_{p,\text{rayonnement}} = \alpha_p \sigma (T_p^4 - T_\infty^4) \pi d_p^2 \quad (3.59)$$

Ce modèle de rayonnement ne prend pas en compte le rayonnement entre les gouttes car celles-ci ont une concentration diluée dans le gaz derrière la flamme aluminium-air ou lors de la post-combustion de charges explosives. Le fait de négliger le rayonnement entre goutte à cause d'un milieu trop dilué a été posé dans d'autres études comme celle de Z. HAMIDOUCHE [45] sur la combustion dans les récatteurs à lit fluidisé. Il est précisé que pour une fraction volumique liquide inférieure à 0,02 le rayonnement entre les particules était négligeable par rapport au rayonnement des parois externes. Or pour nos cas d'étude, la fraction volumique de l'espèce liquide est inférieure à 10^{-5} . Ce modèle est uniquement employé pour le refroidissement de la goutte d'alumine et n'a pas d'impact sur le chauffage de l'aluminium. L'aluminium est sous forme liquide à partir de 933 K et s'évapore rapidement, l'empêchant de rayonner à haute température avant de totalement disparaître.

3.4 Modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium

La modélisation des phases gazeuse et dispersée ayant été définie précédemment, cette section décrit le modèle de la combustion diphasique de l'aluminium qui a été implanté dans le code AVBP au cours de cette thèse. Ce modèle sera employé dans la modélisation de flammes aluminium-air dans la partie 2. De même, il devait être utilisé dans la modélisation de la combustion d'aluminium avec l'air lors de la post-combustion d'une charge explosive, mais son utilisation n'est pas adaptée pour 2 raisons. La première raison est que la combustion de l'aluminium est uniquement avec l'oxygène de l'air. Or dans la littérature, une grande partie des particules d'aluminium s'évaporent et réagissent avec les produits de détonation lors des premières phases de la post-combustion, ce qui conduit à un grand manque d'informations si cette combustion n'est pas prise en compte. Malheureusement les difficultés rencontrées pour mettre en place la combustion diphasique de l'aluminium avec l'air et le manque de temps ne nous ont pas permis de mettre en place la combustion diphasique de l'aluminium avec d'autres oxydants dans AVBP. La deuxième raison est la condition d'utilisation du modèle de combustion diphasique mis en place. La modélisation se base sur un ensemble de particules d'aluminium qui s'évaporent et réagissent en phase gazeuse avec l'oxygène de l'air à travers un front de flamme. Ainsi cette flamme est proche d'un type de flamme de pré-mélange. Mais pour le cas de la post-combustion, les particules d'aluminium sont dispersées dans les produits de détonation et brûlent en tant que particules isolées. Ce régime de combustion met en place une flamme de diffusion autour de la goutte d'aluminium, qui est un régime non prévu par le modèle de combustion diphasique mis en place. Ainsi pour ces raisons, un autre modèle de combustion d'aluminium sera utilisé. Ce modèle est celui des travaux de L. LACASSAGNE [61] sur l'interaction des particules d'aluminium libérées par un propergol solide avec l'écoulement dans une chambre de combustion.

3.4.1 Modélisation développée au cours de cette thèse

La modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium avec l'air développée dans cette thèse est proche de ce qui a été fait dans les travaux de D. H. HAN [46]. La combustion se fera sous phase gazeuse et sera dirigée par le schéma réactionnel tiré de celui de L. CATOIRE [98]. Les particules d'aluminium seront suivies de façon lagrangienne et un modèle d'évaporation sera employé. Mais notre étude se différencie sur la prise en compte de la fusion, de la condensation et du suivi lagrangien de l'alumine.

La Fig. 3.7 présente notre modélisation de la combustion diphasique des particules d'aluminium. Initialement les particules d'aluminium sont sous la forme solide et vont chauffer par conduction et convection au contact du gaz environnant. Arrivé à sa température de fusion, l'aluminium va continuer à absorber l'énergie du gaz pour changer de phase et devenir une goutte. Sa dilatation n'est pas prise en compte dans cette étude lors du changement de phase. Une fois liquide, la goutte va continuer à être chauffée par le gaz pour s'évaporer en aluminium gazeux. À partir de cet instant, l'aluminium gazeux va réagir rapidement avec l'oxygène de l'air et libérer de la chaleur à partir des réactions exothermiques du schéma réactionnel. Dans les produits de combustion se trouvent des oxydes d'aluminium, dont de l'alumine sous forme gazeuse. Or cette espèce n'est pas stable sous cette forme et va se condenser sur des germes d'alumine injectés avec les particules d'aluminium dans le domaine de calcul, ce qui permet de pallier l'absence d'un modèle de nucléation dans

AVBP. Ces germes, qui ont été aussi chauffés par le gaz, vont être à des températures bien plus faibles que leur température d'évaporation et vont permettre la condensation de l'alumine présent dans le gaz. Ce changement de phase va s'accompagner d'un flux d'énergie de changement de phase vers le milieu gazeux. La combustion prendra fin lorsqu'il n'y aura plus d'apport d'aluminium gazeux par évaporation. Ainsi les particules d'alumine se retrouvent dans les produits de combustion avec une taille beaucoup plus importante qu'avant combustion et ont une température qui est celle des produits de combustion. Ces particules chaudes et de surface non négligeable, vont rayonner et se refroidir progressivement.

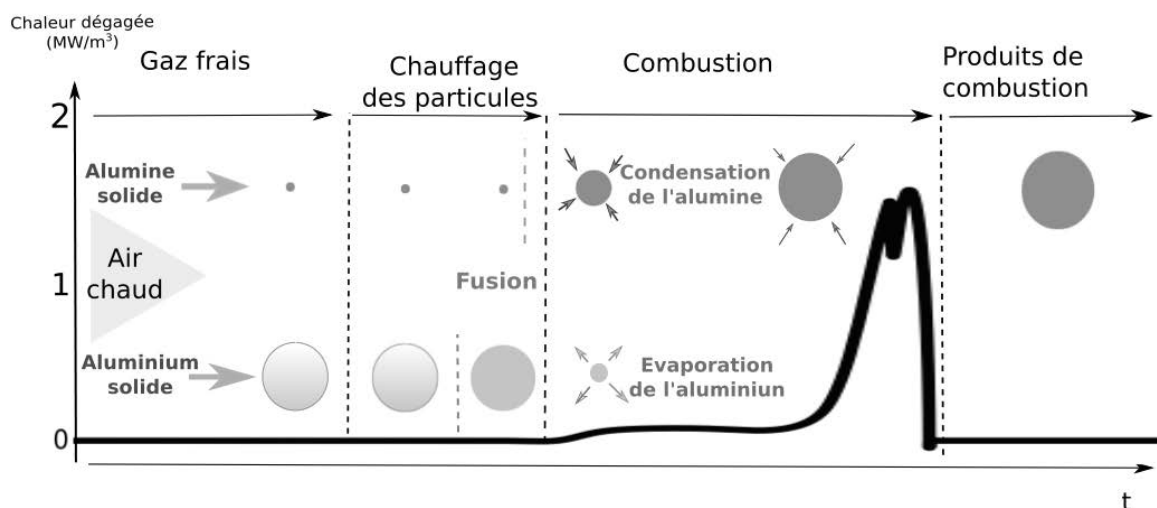


FIGURE 3.7 – Schéma de la combustion diphasique d'une particule d'aluminium avec l'air pré-chauffé au cours du temps. La courbe de la chaleur dégagée est tirée d'une simulation 0D de combustion d'une particule d'aluminium avec de l'air à 3000K en proportion stœchiométrique.

Mis à part le choix et l'utilisation d'un schéma cinétique de combustion gazeuse de l'aluminium avec l'air et d'un modèle d'évaporation, cette combustion diphasique est originale grâce à l'utilisation de germes d'alumine pour capter sa phase gazeuse dans les produits de combustion. Cette méthode est unique à ces travaux et n'a jamais été faite dans la littérature. Dans l'ensemble des cas d'étude Euler-Lagrange de la littérature, l'alumine produite par les flammes aluminium-air reste en représentation eulérienne avec des propriétés thermodynamiques de l'alumine liquide. Le fait d'injecter des germes d'alumine dans l'air permet de récupérer dans le gaz la chaleur dégagée par la condensation de l'alumine et de suivre l'évolution des gouttes d'alumine pendant et après la combustion de l'aluminium. Il n'y aura aucune influence sur les quantités initialement introduites du fait de leurs petites tailles de l'ordre du nanomètre pour des particules d'aluminium de l'ordre du micromètre. La proportion massique d'alumine par rapport à l'aluminium injecté est d'environ de 10^{-10} à 10^{-13} selon la taille des particules d'aluminium. Mais une influence peut être constatée sur l'évolution de la surface d'échange et de la vitesse de condensation avec les quantités de germes initialement introduites.

3.4.2 Modèle simplifié avec cinétique globale

Cette modélisation n'emploie pas une combustion en phase gazeuse de l'aluminium mais se base sur l'utilisation de l'énergie totale libérée par la réaction de combustion entre l'aluminium liquide et l'environnement oxydant.

La Fig. 3.8 présente ce modèle. Initialement les particules d'aluminium sont sous forme solide et vont être chauffées par l'air chaud. Lorsque la particule d'aluminium va atteindre sa température de fusion, un changement d'état aura lieu et elle continuera à absorber de l'énergie de la phase gazeuse jusqu'à la fusion complète de la particule. À l'état liquide, la goutte continuera à être chauffée par le gaz et entamera sa combustion.

Contrairement à la modélisation précédente, l'aluminium va suivre l'évaporation selon le modèle de Spalding mais sans transfert massique vers la phase gazeuse. Les seuls transferts qui auront lieu sont l'apport d'énergie du gaz vers le liquide pour son changement de phase L_v , dont la valeur est $10,9 \cdot 10^6 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ et la chaleur de réaction libérée dans la phase gazeuse qui avoisine $10^7 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1}$ pour une combustion avec l'air. Ainsi la taille de la goutte d'aluminium va se réduire jusqu'à atteindre une taille minimale préalablement établie qui est celle du résidu d'alumine. Lorsque la taille des particules d'aluminium atteint cette limite, le résidu d'énergie correspondant à l'évaporation et à la combustion de la goutte a été libéré. La goutte qui en résulte arrête son évaporation et on la considère comme un résidu d'alumine par la suite.

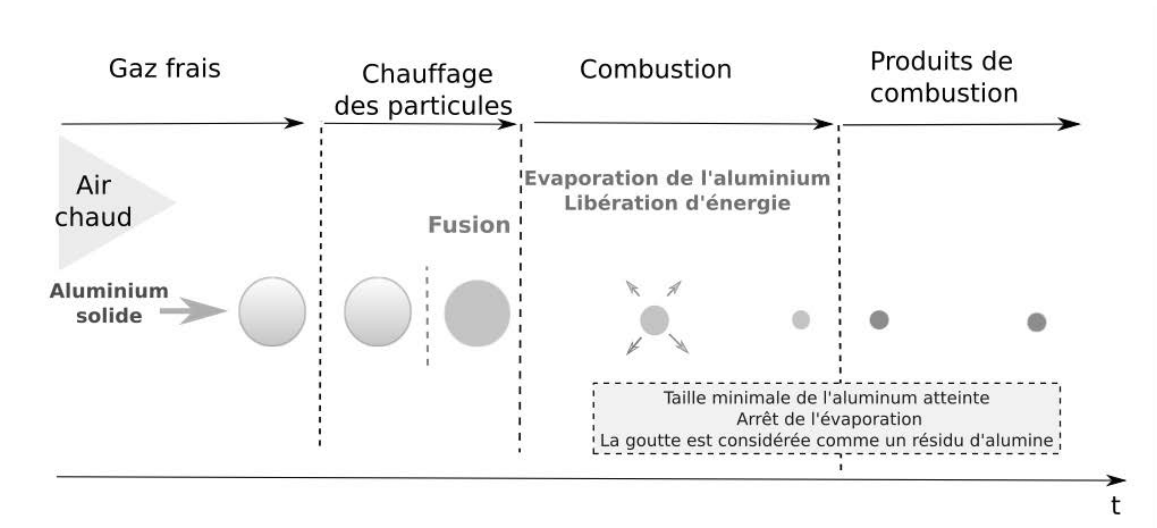


FIGURE 3.8 – Schéma du modèle de combustion d'une particule d'aluminium avec l'air pré-chauffé au cours du temps

Tout comme la modélisation précédente, celle-ci a l'avantage de suivre l'évolution de la particule d'alumine après la combustion et on retrouve le flux d'énergie de celle-ci vers le gaz. Elle n'utilise pas de schéma réactionnel et n'aura aucune influence sur la composition du gaz qui entoure les particules d'aluminium. Ce modèle est similaire à une modélisation de combustion diphasique de particule isolée et sera utilisé dans les cas d'analyse de la post-combustion avec des particules dans la partie 3.

3.5 Post-traitement de la post-combustion

À chaque simulation, le code AVBP fournit des fichiers au format HDF5 à la fréquence choisie. Ces fichiers peuvent être analysés à partir d'outils fournis avec AVBP. Mais pour étudier le phénomène de post-combustion et l'évolution des particules d'aluminium au sein de la boule de feu, il est nécessaire de créer de nouveaux outils. Cette partie va développer les différents post-traitements employés dans ces travaux.

3.5.1 Structure du script de post-traitement

Le post-traitement va traiter la phase gazeuse mais aussi la phase liquide de l'aluminium. La configuration de l'analyse se réalise dans le fichier `paf_config.py` qui regroupe l'ensemble des paramètres d'entrée à indiquer. Ensuite ce fichier va s'appuyer sur un ensemble de scripts traitant les fichiers de sortie, tels que :

`io.py` :

Script qui permet de lire les fichiers d'entrée et d'écrire les fichiers de sortie.

`processing.py` :

Script qui rassemble l'ensemble des routines permettant le post-traitement.

`plot.py` :

Script qui rassemble l'ensemble des routines permettant la création de graphiques.

`turbulent.py` :

Script qui rassemble l'ensemble des routines permettant le traitement de la turbulence présente dans l'écoulement.

`main.py` :

Script qui conduit l'ensemble du post-traitement pour les fichiers "solution" en utilisant l'ensemble des scripts précédents.

Cette structure est illustrée en figure 3.9. Chacune des phases va être analysée et illustrée à partir des graphiques.

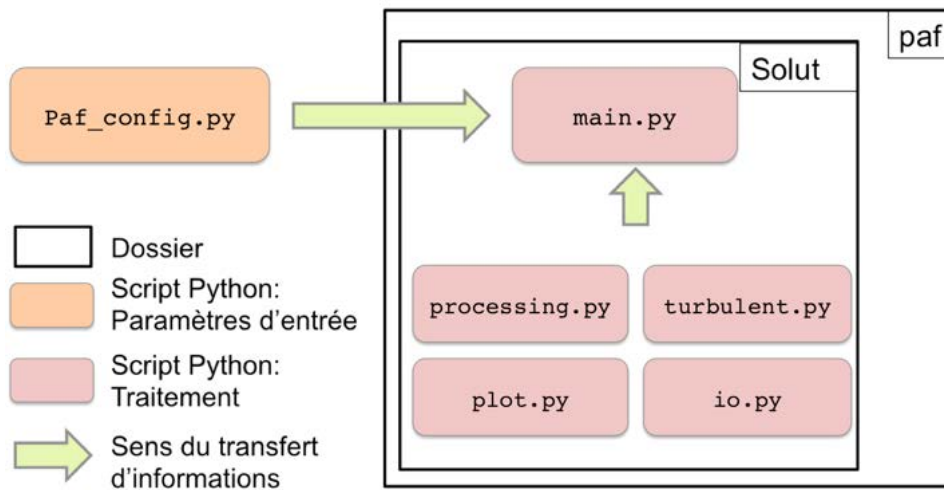


FIGURE 3.9 – Structure et interactions entre les différents scripts Python pour le post-traitement

3.5.2 Phase gazeuse

Le post-traitement pour la phase gazeuse a été décrit par S. COURTIAUD dans sa thèse [25]. À partir des solutions AVBP, il obtient les profils moyens qui lui donnent accès à de nombreux éléments. Les profils moyens permettent de définir le diagramme de marche qui caractérise la post-combustion, à partir du profil de composition et d'un capteur de choc². Le post-traitement de la phase gazeuse peut être illustré par l'arborescence sur la Fig. 3.10.

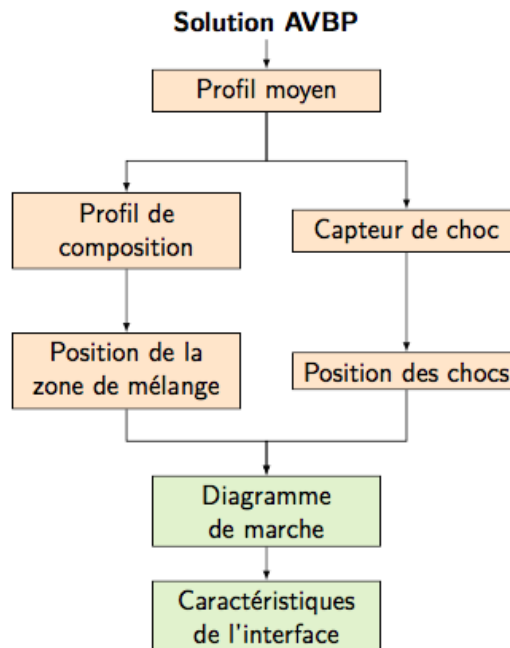


FIGURE 3.10 – Représentation synthétique des étapes du post-traitement pour la phase gazeuse (figure extraite de [25])

3.5.3 Phase liquide

Le post-traitement des résultats AVBP pour la phase liquide est proche de celui de la phase gazeuse. À partir des fichiers de sortie .h5 d'AVBP, il est possible de récupérer l'état de chaque particule dont sa vitesse, sa température et sa position. Grâce à cette dernière, on peut identifier la maille dans laquelle la particule se trouve et obtenir les informations sur le gaz qui entoure la particule.

À partir des vitesses du gaz et de la particule, il est possible d'obtenir la vitesse relative, le nombre de Reynolds et le nombre de MACH de la particule. De même, en récupérant le diagramme de marche issu du post-traitement de la phase gazeuse, il est possible d'y ajouter la dispersion des particules d'aluminium. Une synthèse du post-traitement est illustrée en Fig. 3.11.

Une simulation contient plusieurs millions de particules et il n'est pas nécessaire d'exploiter l'ensemble des données de chaque particule. Un paramètre dans le script de configuration permet à l'utilisateur de choisir quelles particules suivre au cours du temps.

². capteur numérique permettant de déterminer la position du choc

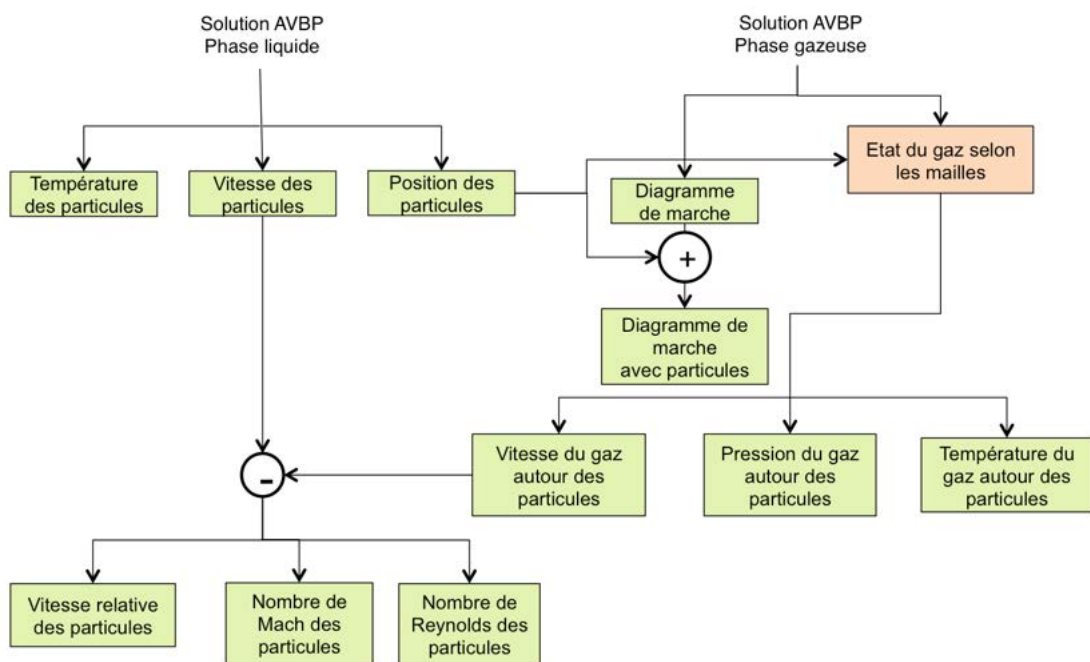


FIGURE 3.11 – Représentation synthétique des étapes du post-traitement pour la phase liquide

Deuxième partie

Étude numérique de la combustion de particules d'aluminium

Chapitre 4

Étude numérique 0D de la combustion de l'aluminium

Ce chapitre est consacré à l'analyse de la combustion 0D de l'aluminium avec l'oxygène de l'air. Ces études permettront de mesurer les durées de combustion des gouttes d'aluminium et de suivre l'évolution des oxydes d'aluminium pour une combustion en proportion stœchiométrique. De même, une étude est faite sur l'influence des paramètres numériques comme le nombre de particules suivies par maille et la proportion de germes d'alumine par rapport aux particules d'aluminium injectées. Pour finir, une analyse est faite sur l'influence de la taille des particules sur les délais de combustion. Pour l'ensemble des cas, le cas de référence est la combustion 0D de particules pré-chauffées à 2000 K de diamètre $7\ \mu\text{m}$ ayant un germe d'alumine pour une particule d'aluminium dans de l'air initialement à 2000 K. Les autres cas dériveront de ce cas de référence.

4.1 Mise en place des cas 0D

4.1.1 Cas d'étude

Dix sept cas 0D sont étudiés. Ils peuvent être résumés avec la Fig. 4.1 où on a un nombre N_p de particules d'aluminium de diamètre d_p avec un nombre N_g de germes d'alumine de diamètre 1 nm. Ces particules sont dans une maille cubique de longueur L qui contient de l'air à température T_i et pression P . Les particules sont initialement pré-chauffées à la température $T_{p,i}$ et leur masse totale permet d'être à la stœchiométrie. Un paramètre $R_{germe} = N_g/N_p$ est établi pour quantifier le nombre de germes d'alumine par particule d'aluminium initialement introduites dans le domaine de calcul.

Pour l'ensemble des cas, le calcul ne comptera qu'une seule particule suivie pour chacune des espèces, telles que l'aluminium et l'alumine. $N_{s,p}$ et $N_{s,g}$ sont respectivement les nombres de particules suivies d'aluminium et d'alumine dans la maille. Ainsi le nombre réel de particules sera récupéré avec l'utilisation d'un nombre de particules virtuelles $N_{v,p}$ et $N_{v,g}$ pour chaque particule suivie. Pour ces cas, le nombre de particules virtuelles pour l'aluminium et l'alumine seront respectivement égales à N_p et N_g . Mais une étude sur l'influence de ces paramètres sera faite dans ce chapitre.

L'ensemble des cas qui seront traités dans ce chapitre sont répertoriés dans le tableau 4.1. Pour chacun des cas, un numéro leur est attribué et sera rappelé dans le titre des sections. L'étude sera portée sur la variation du rapport R_{germe} de 0,1 à 10, sur la variation de la taille des particules d'aluminium d_p de $3\ \mu\text{m}$ à $20\ \mu\text{m}$ et le nombre de particules suivies dans la maille $N_{s,*}$ passant de 1 à 10 pour l'aluminium et l'alumine. La quantité réelle de particules d'aluminium est évaluée pour être en stœchiométrie dans l'ensemble des cas, ce qui conduit à avoir un nombre de particules virtuelles par particule suivie $N_{v,p}$ avec des décimales pour être numériquement le plus proche possible de la stœchiométrie.

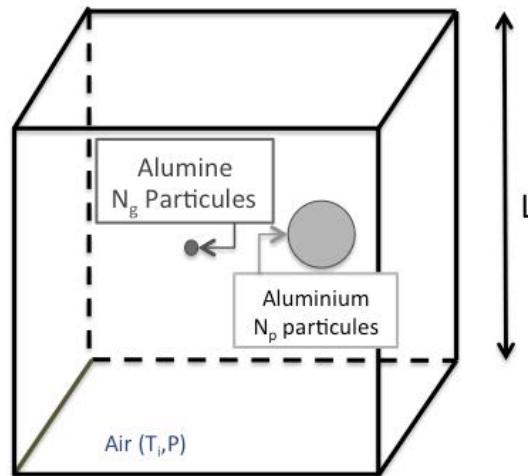


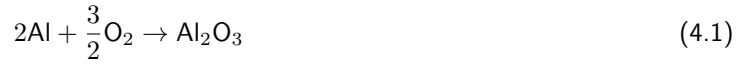
FIGURE 4.1 – Illustration des cas de combustion 0D de particules d'aluminium avec l'air accompagnées de germes d'alumine

TABLE 4.1 – Ensemble des cas de combustion 0D avec des particules d'aluminium et des germes d'alumine (En gras : Cas de référence 0D)

Cas	T_i	$T_{p,i}$	Comb.	d_p	$N_{s,p}$	$N_{v,p}$	R_{germe}
1	2500 K	300 K	non	7 μm	1	1,0	1,0
2	2000 K	-	oui	-	-	-	-
3	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	1,0
4	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	0,0
5	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	0,1
6	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	0,2
7	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	0,5
8	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	2,0
9	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	5,0
10	2000 K	2000 K	oui	7 μm	1	23,32	10,0
11	2000 K	2000 K	oui	3 μm	1	296,29	1,0
12	2000 K	2000 K	oui	5 μm	1	64	1,0
13	2000 K	2000 K	oui	10 μm	1	8,0	1,0
14	2000 K	2000 K	oui	15 μm	1	2,37	1,0
15	2000 K	2000 K	oui	20 μm	1	1,0	1,0
16	2000 K	2000 K	oui	7 μm	5	4,664	1,0
17	2000 K	2000 K	oui	7 μm	10	2,332	1,0

4.1.2 Domaine de calcul

L'étude est faite dans une maille 3D de forme cubique. La dimension de celle-ci est définie pour qu'elle puisse contenir la quantité d'air nécessaire pour brûler les particules d'aluminium de façon stœchiométrique à une température de mélange donnée. Pour conserver un domaine constant pour l'ensemble des cas, la maille est dimensionnée pour une combustion stœchiométrique 0D d'une unique particule de diamètre d_p 20 μm dans l'air à 2000 K. L'état stœchiométrique utilisé est celui de la réaction globale de la formation de l'alumine représentée en Éq. 4.1 :



La richesse Φ de cette réaction globale est définie par l'Éq. 4.2 qui utilise la masse des particules d'aluminium m_{ptcl} et la masse de l'oxydant m_{ox} dans la maille pour le cas étudié. Pour le cas stœchiométrique, les masses utilisées sont respectivement $m_{ptcl,st}$ et $m_{ox,st}$. Elle peut aussi s'exprimer en fonction des fractions massiques Y_i des espèces gazeuses i .

$$\Phi = \frac{m_{ptcl}/m_{ox}}{m_{ptcl,st}/m_{ox,st}} = \frac{m_{Al,s}/m_{O_2}}{Y_{Al,st}/Y_{O_2,st}} \quad (4.2)$$

Le rapport des fractions massiques des espèces gazeuses dans la condition stœchiométrique se calcule en Éq.4.3 à partir des coefficients de la réaction globale (a étant celui de l'aluminium et b celui de l'oxygène) et des masses molaires de l'aluminium M_{Al} et de l'oxygène M_{O_2} .

$$\frac{Y_{Al,st}}{Y_{O_2,st}} = \frac{aM_{Al}}{bM_{O_2}} = \frac{4M_{Al}}{3M_{O_2}} \quad (4.3)$$

Le calcul des masses de l'oxygène et de l'aluminium de densité $\rho_{Al,s}$ sous forme de particules dans l'air se font à partir des Éqs.4.4 et 4.5 qui utilisent l'hypothèse du gaz parfait et le volume de la maille $V = L^3$ avec L la longueur d'un côté de la maille. La constante des gaz parfaits pour l'air est $r = 287,06 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ et la fraction massique de l'oxygène est $Y_{O_2,air} = 0,233$ dans une masse d'air m_{air} .

$$m_{O_2} = Y_{O_2,air}m_{air} = Y_{O_2,air}\rho_{air}V = Y_{O_2,air}V\frac{P}{rT} \quad (4.4)$$

$$m_{Al,s} = \rho_{Al,s}\frac{1}{6}\pi d_p^3 \quad (4.5)$$

Ainsi pour le cas stœchiométrique de la combustion 0D d'une particule d'aluminium de taille $20 \mu\text{m}$ dans de l'air initialement à 2000 K et à une pression de 1 bar , la maille a un volume de :

$$V = \frac{m_{Al,s}}{Y_{O_2,air}P/(rT)} \frac{Y_{O_2,st}}{Y_{Al,st}} = 2,129 \cdot 10^{-10} \text{ m}^3 \text{ avec } L=0,597 \text{ mm} \quad (4.6)$$

4.2 Décomposition de la combustion diphasique de l'aluminium

La combustion diphasique de l'aluminium avec l'air peut se décomposer en 2 phénomènes si la combustion en surface est négligée. Ces phénomènes, qui interagissent l'un avec l'autre, sont les changements de phase et la combustion en phase gazeuse. Ces 2 étapes sont étudiées séparément dans cette section. Elles mettront en avant des temps caractéristiques et des ordres de grandeur sur les températures et l'énergie dégagée associée à ces derniers.

4.2.1 Validation des changements de phase : Cas 1

Pour l'analyse des changements de phase de l'aluminium et de l'alumine, la combustion en phase gazeuse est désactivée. La maille ne contient qu'une particule d'aluminium de $7 \mu\text{m}$ et un germe d'alumine avec une température initiale respectivement à 300 K et à 2500 K . Pour ce seul cas d'étude, la phase gazeuse n'est pas de l'air mais elle est composée d'une fraction massique d'azote et d'alumine avec des fractions massiques respectives de $Y_{N_2} = 0,985$ et $Y_{Al_2O_3} = 0,015$ avec une température initiale à 2500 K et à pression ambiante. La fraction massique initiale d'alumine est définie non nulle et arbitrairement pour permettre sa condensation sur le germe d'alumine.

La Fig. 4.2 illustre l'évolution du diamètre des particules et de la température du gaz au cours du temps. La fraction volumique de l'aluminium solide dans la maille étant faible avec $\alpha_p = 6,75 \cdot 10^{-7}$, le chauffage et le changement de phase de l'aluminium ont peu d'influence sur la température du gaz. La particule d'aluminium

s'évapore et disparaît totalement au bout de 1,08 ms. Contrairement à cette particule, la particule d'alumine permet la condensation de l'alumine du gaz présent initialement dans la maille et a un diamètre qui augmente au cours du temps. Ainsi le diamètre de la particule d'alumine augmente de 1 nm à 6,51 μm . Ce changement de phase a pour conséquence de libérer l'énergie liée à la condensation de l'alumine vers le gaz, ce qui engendre une légère augmentation de la température de celui-ci. Cette augmentation de température s'élève à 176 K. Une étude analytique est faite pour vérifier cette température finale du gaz en utilisant les propriétés définies dans la section 1.2. En prenant en compte le chauffage des particules, la fusion, l'évaporation totale d'une particule d'aluminium de 7 μm et la condensation d'une goutte d'alumine allant jusqu'à 6,51 μm de diamètre, la température finale du gaz obtenue est de 2644 K. Une faible différence de 32 K est alors constatée et peut s'expliquer par des simplifications faites dans le calcul analytique. Ainsi les résultats de simulations sont cohérents avec la théorie.

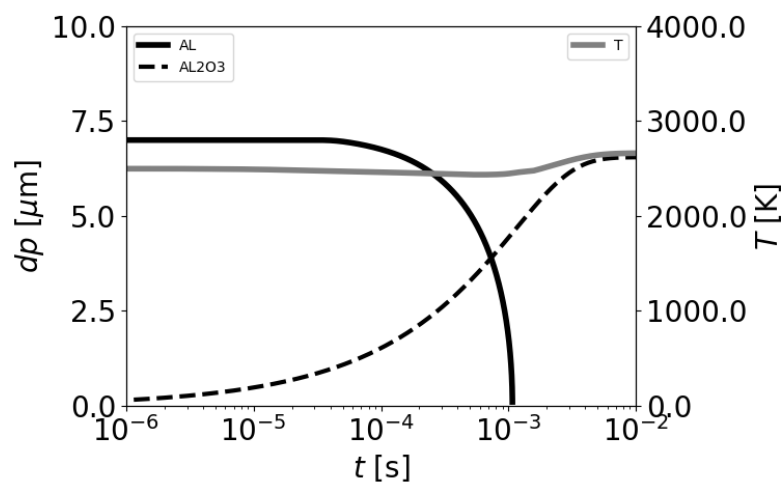


FIGURE 4.2 – Évolution de la température du gaz et du diamètre de la particule d'aluminium et du germe d'alumine au cours du temps

Les Fig. 4.3 (a) et (b) représentent respectivement l'évolution du diamètre et de la température des particules d'aluminium et d'alumine au cours du temps. Pour le cas de l'aluminium, la particule initialement solide est chauffée par la phase gazeuse grâce à la conduction jusqu'à sa température de fusion. À $T = 933 \text{ K}$, la température de l'aluminium arrête d'augmenter car la particule passe de la phase solide à liquide en absorbant l'énergie thermique nécessaire. Ce délai de changement de phase est très court et avoisine les 5 μs . Une fois liquide, l'aluminium va pouvoir s'évaporer selon le modèle de SPALDING. Le diamètre de la particule diminue et sa température augmente jusqu'à atteindre celle du gaz qui est plus faible que la température « humide » de l'aluminium (terme défini dans la section 3.3.6.2). Pour l'alumine, la particule est initialement à l'état liquide avec une température supérieure à sa température de fusion qui est de 2370 K. La petite taille du germe d'alumine conduit à une évolution de la température de la goutte qui est identique à celle du gaz. La condensation de l'alumine conduit à l'augmentation de la taille de la goutte et à l'émission d'un flux de chaleur vers la phase gazeuse qui la chauffera à son tour. Lorsque la condensation est terminée, l'alumine a un diamètre qui n'évolue plus et a une température qui est égale à celle du gaz.

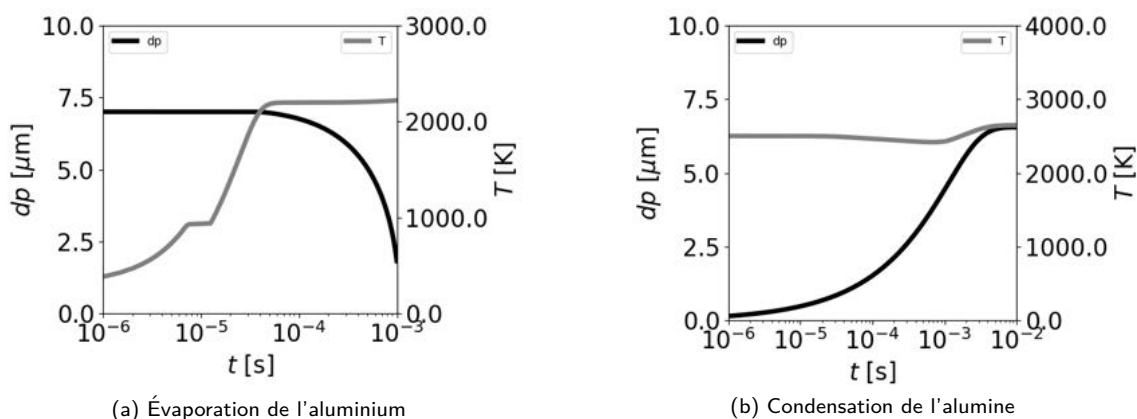


FIGURE 4.3 – Évolution temporelle du diamètre et de la température de la phase condensée

4.2.2 Combustion de l'aluminium gazeux avec de l'air : Cas 2

L'analyse de la combustion de l'aluminium sous forme gazeuse avec l'air est faite à la stœchiométrie. Elle est calculée avec la réaction globale de formation de l'alumine. Ainsi le gaz est composé d'une fraction massique d'aluminium de $Y_{Al} = 0,203$ et d'air dont les fractions massiques de l'oxygène et de l'azote dans le gaz sont $Y_{O_2} = 0,188$ et $Y_{N_2} = 0,609$. Le mélange est initialement à 2000 K et à la pression ambiante (1 bar). Ce cas ne comporte pas de germes d'alumine ce qui empêche sa condensation et la laissera en phase gazeuse.

La Fig. 4.4 représente l'évolution de la température du mélange et de la chaleur dégagée par les réactions de combustion au cours du temps. La température augmente de 2500 K à 3633 K durant un très court délai de 0,11 μ s. Cette élévation rapide de la température s'explique par la quantité élevée de chaleur dégagée par les réactions de combustion dont le pic est de $22,7 \text{ TW}\cdot\text{m}^{-3}$. Cette estimation de la température du mélange en fin de combustion est de 109 K plus grande que celle calculée sur CANTERA. Cette dernière a été obtenue en calculant l'équilibre thermodynamique d'un mélange stœchiométrique à 2000 K et à la pression atmosphérique. La base de donnée utilisée pour ce calcul est « alu2.cti » et a été fournie par le CEA. Cette différence entre AVBP et CANTERA peut être liée aux conditions limites. AVBP résout un système avec une sortie des gaz froids, contrairement à CANTERA qui est un système isolé et n'échange pas de masse avec l'extérieur. Cet échange de masse peut alors expliquer la faible différence de température.

La Fig. 4.5 représente l'évolution de la fraction massique de quelques oxydes d'aluminium au cours du temps superposée à la chaleur dégagée par les réactions de combustion. Lors de cette combustion sans particule, l'aluminium en phase gazeuse va réagir très rapidement avec l'oxygène de l'air. Dans les premiers instants, les fractions massiques de l'aluminium et l'oxygène vont diminuer pour atteindre $Y_{Al} = 0,0211$ et $Y_{O_2} = 0,0422$ dans les gaz brûlés. Le fait de retrouver des réactifs dans les gaz brûlés signifie qu'un équilibre a été trouvé avec les autres oxydes d'aluminium à cette température. En ce qui concerne les oxydes d'aluminium, ils sont formés durant la combustion et apparaissent dans les produits de combustion à l'équilibre avec le reste des réactifs. Ainsi on peut mesurer leur présence dans les gaz brûlés, $Y_{AlO} = 0,113$ et $Y_{Al_2O_2} = 0,063$ qui sont visibles sur le graphique, mais aussi $Y_{Al_2O} = 0,087$ et $Y_{AlO_2} = 6,03 \cdot 10^{-3}$ qui ne sont pas affichés sur celui-ci. Pour l'alumine, sa fraction massique reste très faible au cours du temps avec un pic à $Y_{Al_2O_3} = 0,015$ à 15 ns et $Y_{Al_2O_3} = 5,97 \cdot 10^{-3}$ dans les gaz brûlés. Cette faible valeur peut s'expliquer par l'absence de la phase liquide d'alumine ce qui ne permet pas la condensation de l'alumine gazeuse. L'alumine liquide est le produit de combustion de la réaction globale de l'aluminium avec l'air et il ne peut pas intervenir comme intermédiaire de réaction. Or pour le cas où l'alumine reste sous la forme gazeuse, il est considéré comme un intermédiaire de réaction et va intervenir dans d'autres réactions du schéma. Ainsi l'équilibre établi a très peu d'alumine en phase gazeuse vis à vis des autres oxydes d'aluminium, comme l'AlO ou l'Al₂O.

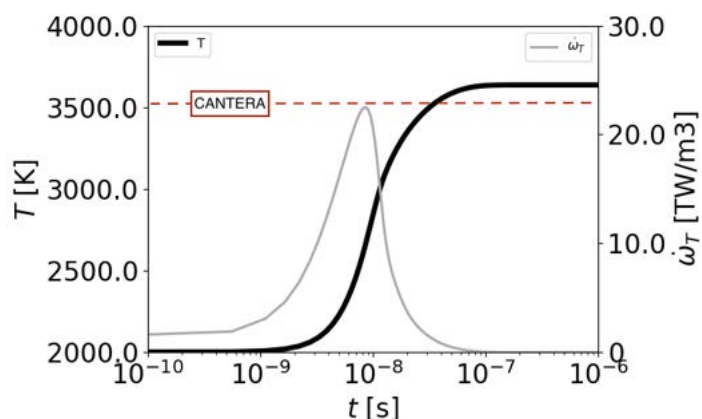


FIGURE 4.4 – Évolution de la température du gaz et de l'énergie dégagée par la combustion au cours du temps

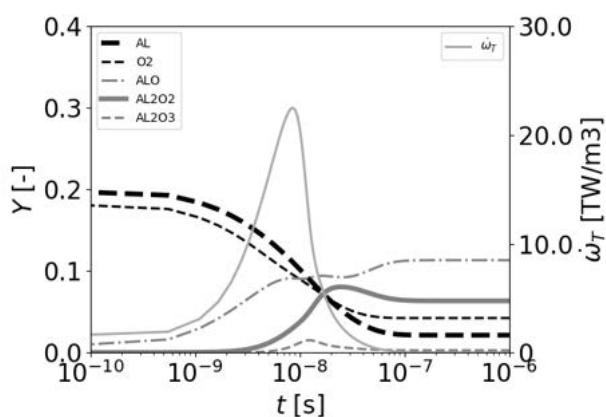


FIGURE 4.5 – Évolution des fractions massiques et de l'énergie dégagée par la combustion au cours du temps

À propos des temps caractéristiques entre le cas 1 et 2, le temps d'évaporation d'une particule d'aluminium micrométrique est de l'ordre de la milliseconde, soit 10^4 fois plus lente que pour la combustion gazeuse du cas 2. Il est raisonnable de penser que la combustion des particules d'aluminium sera limitée par l'évaporation de celle-ci pour les prochains cas d'étude sur la combustion diphasique.

4.3 Combustion stœchiométrique de l'aluminium avec l'air

Dans ces cas d'étude, la combustion se fait entre de l'aluminium présent en phase dispersée et de l'air, introduits en proportion stœchiométrique. Cette étude nous permet de mesurer un temps de combustion des particules d'aluminium et de le comparer à ceux extraits dans la littérature. La composition du gaz au cours de la combustion, la température et la chaleur dégagée par les réactions sont analysées.

Pour le cas 3, la maille ne contient qu'une seule particule suivie d'aluminium et de germe d'alumine qui représentent chacune un nombre $N_{v,p} = N_{v,g} = 23,32$ de particules virtuelles. Ce qui donne un nombre total de particules d'aluminium $N_p = 23,32$ et de germes d'alumine $N_g = N_p$ car $R_{germe} = 1,0$. Ce nombre total de particules est celui que l'on doit avoir dans la maille pour être en condition stœchiométrique avec

de l'air à 2000 K et à pression ambiante. Contrairement au cas 1, la particule d'aluminium est initialement pré-chauffée à la température du gaz pour permettre d'avoir une température de mélange gazeux proche du cas sans particules (cas 2). Ce pré-chauffage aura pour conséquence de ne pas traiter la fusion de l'aluminium et de réduire le temps de combustion des particules. Pour prendre en compte la fusion, il aurait fallu utiliser une température plus basse, ce qui aurait rendu l'allumage de la combustion plus lente. L'influence du nombre de particules suivies dans la maille sera étudiée dans les cas 16 et 17.

4.3.1 Combustion de l'aluminium pré-chauffé : Cas 3

Les particules d'aluminium de diamètre $7\ \mu\text{m}$ sont initialement en phase liquide et ont une température initiale de 2000 K. Les germes d'alumine sont sous la forme solide et ont une température initiale de 2000 K. Le gaz entourant les particules est de l'air à 2000 K. La Fig. 4.6 représente l'évolution du diamètre des particules et celle de la chaleur dégagée par les réactions de combustion aluminium-air. Contrairement au cas 1, les particules d'aluminium sont initialement en phase liquide et il n'y a pas d'étape de chauffage des particules. L'aluminium s'évapore dans les premiers instants et permet à la combustion de commencer rapidement. Les particules s'évaporent progressivement jusqu'à disparaître à 0,58 ms. L'alumine gazeuse se condense peu de temps après le début de l'évaporation de l'aluminium. À $1,4\ \mu\text{s}$, le diamètre des particules d'alumine commence à augmenter progressivement, ce qui signifie que de l'alumine gazeuse vient d'être formée dans la phase gazeuse. Il va continuer à augmenter jusqu'à atteindre une valeur finale de $4,58\ \mu\text{m}$ à 1,2 ms. L'instant associé à la fin de la croissance de l'alumine est plus tardif que celui de l'évaporation totale des gouttes d'aluminium. Ce retard est lié à la condensation progressive de l'alumine et des réactions intermédiaires qui interviennent pour former d'avantage d'alumine gazeuse. Si la chaleur dégagée semble nulle après la disparition de l'aluminium, celle-ci est en réalité très faible et représente l'ensemble des réactions qui produisent de l'alumine gazeuse avant d'atteindre l'équilibre.

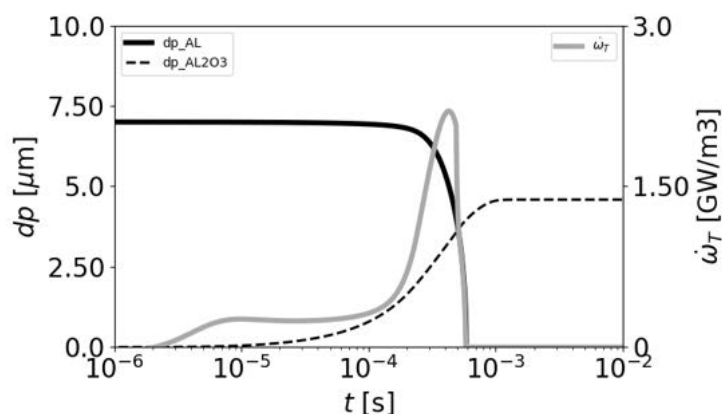


FIGURE 4.6 – Évolution du diamètre et de la température des particules d'aluminium et d'alumine au cours du temps

La Fig. 4.7 représente l'évolution de la température du gaz et de l'énergie dégagée par les réactions de combustion. Dès les premiers instants, la particule d'aluminium est sous forme liquide et va s'évaporer progressivement, fournir de l'aluminium gazeux et permettre le démarrage de la combustion. Jusqu'à $8\ \mu\text{s}$, l'évolution de la chaleur dégagée par les réactions de combustion montre que l'aluminium gazeux est produit de plus en plus vite grâce à l'accélération de l'évaporation. De $8\ \mu\text{s}$ à $40\ \mu\text{s}$, le gaz et les particules d'aluminium ont les mêmes températures et le débit d'aluminium gazeux lié à l'évaporation est faible. Ainsi la chaleur dégagée au cours du temps varie peu et reste à une valeur de $0,29\ \text{GW}\cdot\text{m}^{-3}$. À partir de $40\ \mu\text{s}$, des réactions intermédiaires s'activent et elles sont très exothermiques. La température du gaz augmente et conduit à son tour à l'aug-

mentation de la température des particules d'aluminium. Cette augmentation entraîne une évaporation plus rapide et une forte croissance de la chaleur dégagée jusqu'à atteindre un pic à $2,23 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$. L'aluminium disparaissant à $0,58 \text{ ms}$, le débit d'aluminium gazeux s'arrête et entraîne une chute de la chaleur dégagée à cause de l'arrêt de la majeure partie des réactions de combustion. Mais une rupture de pente de l'évolution de la température a lieu à $0,48 \text{ ms}$, soit $0,1 \text{ ms}$ avant la disparition de l'aluminium. Elle est due à l'énergie dégagée par la condensation de l'alumine. Ainsi la condensation, accompagnée de quelques réactions intermédiaires qui équilibrent la phase gazeuse, vont conduire à augmentation de la température du gaz jusqu'à atteindre 3472 K .

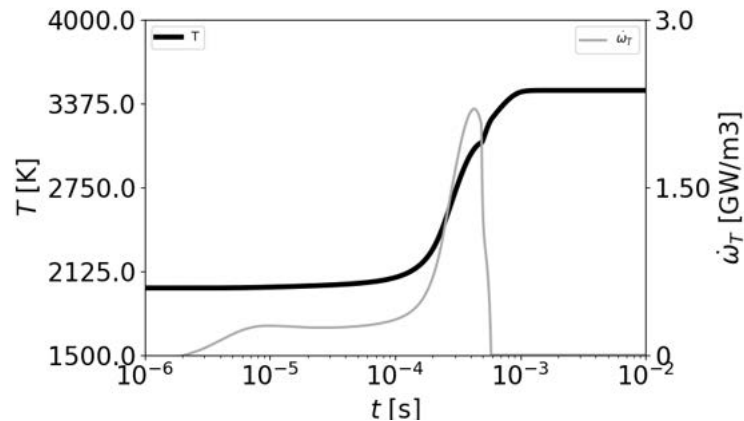


FIGURE 4.7 – Évolution de la température du gaz et de la chaleur dégagée par la combustion au cours du temps

La Fig. 4.8 représente l'évolution de la fraction massique des espèces gazeuses telles que l'aluminium, l'oxygène et des oxydes d'alumine au cours du temps. Jusqu'à l'évaporation totale des particules d'aluminium à $0,58 \text{ ms}$, l'aluminium gazeux est consommé trop rapidement au contact de l'oxygène de l'air pour s'accumuler dans la phase gazeuse ce qui conduit à la formation d'oxydes comme l'alumine. À partir de $40 \mu\text{s}$, les réactions fortement exothermiques entrent en jeu et ce graphique montre une formation plus intensive de l'alumine. Mais les particules d'alumine n'ont pas une surface d'échange suffisamment grande pour condenser suffisamment vite la totalité de l'alumine gazeuse et provoque un accumulation de celle-ci dans le gaz. Ainsi les réactions de formation d'alumine entraînent une augmentation de la température du gaz et ce qui provoque ensuite une augmentation de la vitesse d'évaporation de l'aluminium. La quantité d'alumine gazeuse augmente jusqu'à activer des réactions intermédiaires qui forment des oxydes d'aluminium comme d' Al_2O_2 . À cet instant, la quantité d'alumine gazeuse va diminuer à cause de sa consommation pour la formation d'autres oxydes d'aluminium et de l'augmentation de la surface d'échange des germes d'alumine qui augmente la vitesse de condensation au cours du temps. À partir de $0,30 \text{ ms}$, les particules d'alumine sont suffisamment grosses pour avoir un taux de condensation plus important que le taux de production d'alumine des réactions, ce qui entraîne une chute de la fraction massique de l'alumine gazeuse. Cette consommation d'alumine pousse les oxydes d'aluminium restant à réagir en faveur de la formation d'alumine pour retrouver un équilibre. Ainsi un équilibre est atteint à $1,35 \text{ ms}$ avec les fractions massiques $Y_{\text{Al}_2\text{O}_2} = 1,15 \cdot 10^{-3}$, $Y_{\text{AlO}_2} = 5,5 \cdot 10^{-3}$, $Y_{\text{Al}_2\text{O}} = 7,3 \cdot 10^{-2}$ et $Y_{\text{AlO}} = 8,1 \cdot 10^{-2}$. La fraction massique d'alumine atteint un maximum à $Y_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 2,2 \cdot 10^{-2}$ avant que la surface d'échange du germe ne soit suffisamment grande pour ensuite avoir une valeur qui se réduit à $Y_{\text{Al}_2\text{O}_3} = 4,7 \cdot 10^{-3}$ à l'équilibre. Comme pour le cas 2, la fraction massique d'aluminium est non nulle à l'équilibre et possède une valeur de $Y_{\text{Al}} = 9,5 \cdot 10^{-3}$.

Le temps de combustion pour le cas 3 est de $0,58 \text{ ms}$. Il faut noter que, comme les particules d'aluminium sont initialement à 2000 K il ne tient pas compte du délai nécessaire pour les chauffer et les faire fondre, qui existerait en temps normal où leur température initiale serait proche de 300 K . Cette durée de combustion est très supérieure à la durée de combustion gazeuse étudiée dans le cas 2 mais elle est du même ordre

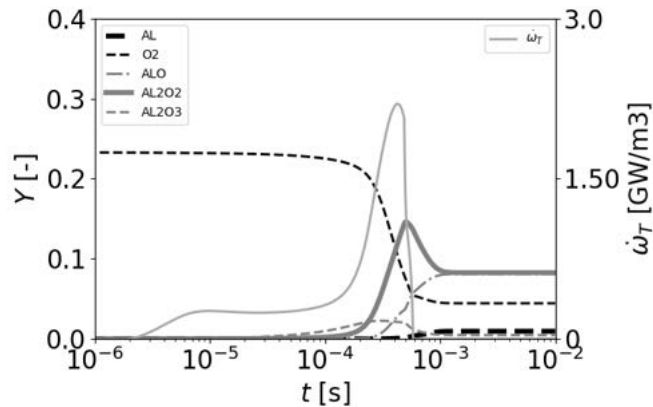


FIGURE 4.8 – Évolution de la composition de la phase gazeuse et de la chaleur dégagée par la combustion au cours du temps

de grandeur que celle obtenue dans le cas 1. Ainsi la combustion de particules d'aluminium étant limitée par l'évaporation, la combustion des particules d'aluminium a un temps caractéristique beaucoup plus grand que celui de la combustion en phase gazeuse. La Fig. 4.9 reprend les temps de combustion des particules d'aluminium avec l'air en fonction de leur taille. Ces durées sont issus de la littérature. En superposant le temps obtenu dans ce cas, on constate que les paramètres choisis pour le modèle d'évaporation de SPALDING permettent d'être en accord avec les temps de combustion estimés par la loi $d^{1.8}$. Mais cette durée est plus faible que celle estimée pour la combustion des petites particules à 2000 K par le modèle de Y. HUAN [51].

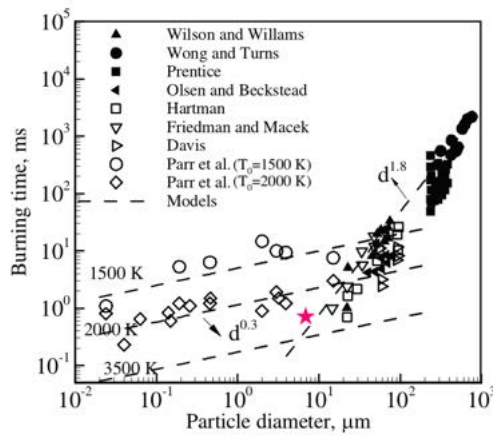


FIGURE 4.9 – Durée de combustion de l'aluminium en fonction du diamètre des particules pour des cas expérimentaux et le cas 3 (étoile rouge)[51]

4.3.2 Vérification numérique du nombre de particules suivies : Cas 16 et 17

Les cas 16 et 17 diffèrent du cas 3 par l'augmentation du nombre de particules suivies $N_{s,*}$ dans la maille, mais ils gardent le même nombre de particules réelles N_p . Cela est possible en diminuant le nombre de particules virtuelles $N_{v,*} = N_p/N_{s,*}$ où $N_p = 23,32$. Ainsi les cas 16 et 17 ont respectivement $N_{s,p} = 5$ et $N_{s,p} = 10$ particules d'aluminium. De même pour le nombre de particules suivies d'alumine avec $N_{s,g} = N_{s,p}$. Ces cas sont comparés au cas 3 où juste une seule particule suivie est présente dans la maille $N_{s,p} = 1$. En partant des mêmes conditions initiales sur les particules et le gaz que le cas 3, l'évolution de la température du gaz est tracée sur la Fig. 4.10 pour chacun des cas. L'ensemble des courbes de température se superposent parfaitement au cours du temps pour l'ensemble des cas. Ainsi le nombre de particules suivies dans une maille n'a pas d'influence sur les propriétés de la combustion des particules d'aluminium dans le cas 0D.

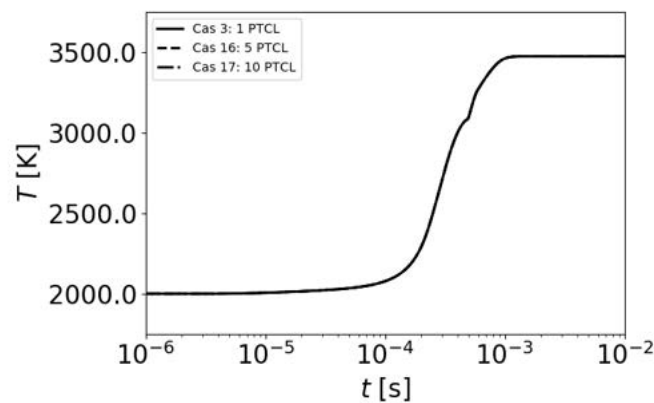


FIGURE 4.10 – Superposition des évolutions temporelles de la température du gaz selon le nombre de particules suivies dans la maille

4.4 Influence de la condensation de l'alumine

Cette section présente une analyse de l'influence de la condensation de l'alumine sur la combustion des particules d'aluminium en configuration 0D. Cette analyse est menée à partir des cas 5 à 11 qui sont construits à partir du cas 3 en faisant varier le nombre de particules d'alumine dans la maille. Le cas 4 ne contient pas de germes d'alumine dans la maille. Ainsi, la simulation associée contient uniquement des particules d'aluminium pré-chauffées en quantité stœchiométrique avec l'air et ne prend pas en compte la condensation de l'alumine. Pour les autres cas (cas 5 à 10), les germes d'alumine sont présents mais le rapport R_{germe} entre le nombre de germes d'alumine sur le nombre de particules d'aluminium va varier entre 0,1 et 10. Ces cas permettent de mettre en avant l'influence du nombre de germes d'alumine par rapport au nombre de particules sur les caractéristiques de la combustion des particules d'aluminium.

4.4.1 Combustion de l'aluminium sans germe d'alumine : Cas 4

L'ajout des germes d'alumine dans la maille va avoir deux principaux impacts directs sur la phase gazeuse. La première est un flux de masse d'alumine positif de la phase gazeuse vers la phase dispersée. La seconde est un flux de chaleur positif vers la phase gazeuse lors de la condensation de l'alumine. La Fig. 4.11 superpose les évolutions temporelles de la température du gaz et de la fraction massique d'alumine dans le gaz pour le cas avec des germes d'alumine (cas 3) et le cas sans germes (cas 4). Pour le cas sans germes, le temps de combustion est de 0,81 ms et la température du gaz atteint 3052 K à l'équilibre. Si ces résultats sont confrontés

à ceux obtenus dans le cas 3, il est évident que l'ajout des germes d'alumine accélère la combustion et conduit à une augmentation de la température finale. Ces effets sont liés au flux de chaleur émis vers la phase gazeuse lors de la condensation de l'alumine. Comme la phase gazeuse est chauffée plus rapidement, l'évaporation de l'aluminium est accélérée et conduit à une réduction de 0,23 ms de la durée de combustion ce qui est cohérent avec le fait que la cinétique est limitée par l'évaporation.

Lorsque des germes d'alumine sont présents (cas 3), une rupture de pente était observée sur l'évolution de la température peu de temps avant l'évaporation totale de l'aluminium. En l'absence de germe d'alumine (cas 4), la rupture de pente et l'augmentation de température qui suit ne sont pas présentes, ce qui signifie que l'augmentation de 420 K est uniquement liée à la condensation de l'alumine. Cette analyse est validée par l'évolution de la fraction massique d'alumine au cours du temps. Pour le cas sans particule, la fraction massique d'alumine atteint un maximum à $Y_{Al_2O_3} = 0,047$ avec un équilibre à $Y_{Al_2O_3} = 0,027$. Ces valeurs sont plus grandes que celles du cas 3 et montrent qu'une grande quantité d'alumine est condensée dans le cas 3. L'évolution des fractions massiques de l'alumine $Y_{Al_2O_3}$ pour les deux cas montrent l'effet de l'augmentation du diamètre du germe d'alumine sur la condensation de la phase gazeuse. Jusqu'à 0,1 ms, l'évolution de $Y_{Al_2O_3}$ est identique dans les deux cas, mais leur évolution diverge à partir de cet instant. Cette divergence est liée à une surface d'échange de l'alumine suffisamment grande pour permettre une condensation efficace de l'alumine gazeuse. La vitesse de condensation va augmenter avec la taille des particules d'alumine ce qui conduit à l'augmentation de la surface d'échange. Cette vitesse dépassera la vitesse de formation de l'alumine à 0,3 ms et conduit à une baisse de sa fraction massique malgré la poursuite de l'évaporation de la particule d'aluminium. L'évaporation complète de l'aluminium intervient peu de temps après où les fractions massiques d'alumine $Y_{Al_2O_3}$ se différencient entre les cas. À la fin de la combustion, l'écart constaté entre les fractions massiques de l'alumine est lié, en grande partie, par la condensation de l'alumine et par déplacement de l'équilibre chimique qui favorise plus ou moins la production d'alumine gazeuse à la température des gaz brûlés.

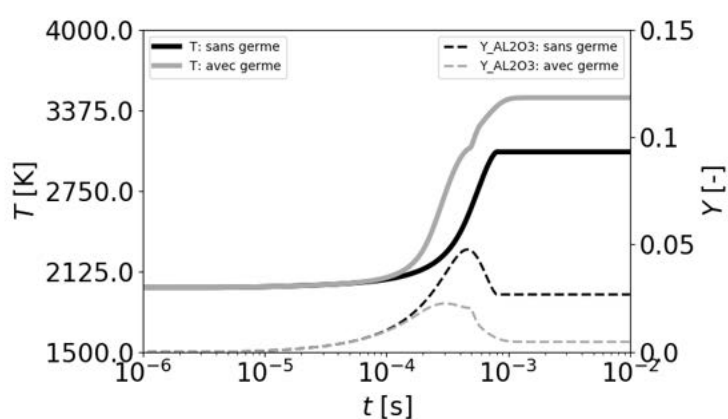


FIGURE 4.11 – Évolution de la température de la phase gazeuse et de la fraction massique d'alumine dans le gaz en fonction de la présence (Cas 3) ou de l'absence de germes d'alumine (Cas 4)

4.4.2 Variation du nombre de germes d'alumine : Cas 5 à 10

La méthode impliquant l'ajout de germes d'alumine nous dispense de la mise en place d'un modèle complexe de nucléation. Une étude paramétrique est alors menée pour connaître l'influence numérique du nombre de germes initialement injectées avec l'aluminium. Les germes d'alumine sont ajoutés initialement dans la maille sans influencer de façon significative la masse totale de la phase dispersée. Pour le cas où il y a un germe d'alumine pour une particule d'aluminium, le rapport de masse entre l'alumine et l'aluminium dans la maille est $3,23 \cdot 10^{-12}$ et la fraction volumique de l'alumine dans la maille est $\alpha_v = 5,759 \cdot 10^{-17}$. Mais l'influence du

rapport R_{germe} entre le nombre de germes réels d'alumine et le nombre de particules réelles d'aluminium peut avoir une influence sur l'évolution de la combustion. Cette étude est faite avec 6 cas où R_{germe} varie entre 0,1 et 10. Ainsi il y a 3 cas (les cas 5, 6 et 7) avec moins d'un germe d'alumine pour une particule d'aluminium, puis il y a 3 cas (les cas 8, 9 et 10) avec plus d'un germe d'alumine pour une particule d'aluminium. Pour ces différents cas, l'évolution temporelle de la température dans la maille est tracée avec le cas où $R_{germe} = 1$ (cas 3) comme référence. Ce cas est le plus proche de la physique avec l'apparition d'un unique lobe d'alumine liquide lors de la combustion d'une particule d'aluminium.

Les Figs. 4.12 (a) et (b) représentent l'évolution de la température du gaz dans la maille et des particules d'alumine pour les cas où $R_{germe} \geq 1$ (les cas 3, 8, 9 et 10). L'augmentation du rapport R_{germe} provoque une réduction du délai précédant l'augmentation de la température, ce qui signifie que la combustion accélère. Cela peut s'expliquer grâce à l'augmentation de la surface d'échange de l'alumine avec le rapport R_{germe} . Comme il a été vu dans le cas 3, dans les premiers instants de la combustion, le taux de production d'alumine gazeuse est supérieur à son taux de consommation dû à la condensation sur les germes. Or en augmentant le nombre de germes d'alumine pour une particule d'aluminium, la surface d'échange augmente et permet d'augmenter la vitesse de condensation. Le flux de chaleur lié au changement de phase de l'alumine atteint des valeurs significatives plus tôt ce qui permet d'accélérer la combustion. Dans les instants proches de l'évaporation totale de l'aluminium, le rapport R_{germe} a une influence sur la température à l'équilibre et sur la rupture de pente observée, dans le cas 3, sur l'évolution temporelle de la température. L'augmentation du nombre de germes pour une particule d'aluminium conduit à une diminution de la température à l'équilibre et à une accentuation de la rupture de pente. Ces conséquences ont la même cause : le changement de phase de l'alumine. Les germes d'alumine sont initialement en phase solide à 2000 K et permettent la condensation puis la solidification de l'alumine gazeuse produite par les réactions de combustion. Ces réactions et la condensation chauffent la phase gazeuse qui dépassera la température de fusion de l'alumine qui est à 2350 K. À partir de cette température, l'alumine accumule l'énergie thermique nécessaire pour changer de phase et sa température n'évoluera plus durant cette période. Pour les cas $R_{germe} = 1$ et $R_{germe} = 2$, ce changement de phase ne provoque qu'une légère rupture de pente et les températures à l'équilibre sont très proches. Mais pour les cas $R_{germe} = 5$ et $R_{germe} = 10$, la fusion de l'alumine influence grandement la combustion de l'aluminium. La condensation de l'alumine gazeuse sur les germes d'alumine solides augmente leur taille, leur masse et provoque l'émission d'un flux thermique en direction de la phase gazeuse. Lorsque l'alumine arrive à sa température de fusion, elle change de phase et la masse d'alumine augmente avec R_{germe} . Ainsi les particules d'alumine restent dans leur état de transition après l'évaporation totale de l'aluminium et un blocage de la chimie a lieu, ce qui conduit à une diminution de la température des gaz à l'équilibre. La rupture de pente représente l'instant où les particules d'alumine sont passées de l'état solide à liquide.

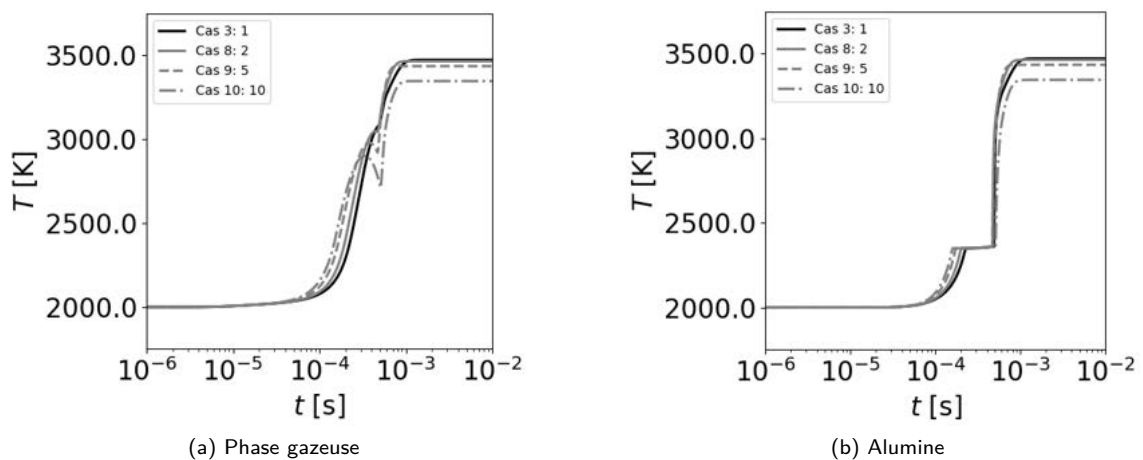


FIGURE 4.12 – Évolution temporelle de la température selon l'augmentation du rapport R_{germe}

Les Figs. 4.13 (a) et (b) représentent l'évolution de la température du gaz de la maille et des particules d'alumine pour les cas où $R_{germe} \leq 1$ (les cas 3, 5, 6 et 7). Contrairement aux cas où $R_{germe} \geq 1$, la rupture de pente disparaît progressivement avec la diminution du rapport R_{germe} pour ensuite s'inverser. Dans le cas où $R_{germe} \geq 1$, il a été observé que l'augmentation de la quantité d'alumine qui doit changer de phase peut conduire à bloquer la combustion. En réduisant la proportion de germes d'alumine à moins de un germe par particule d'aluminium, la condensation de l'alumine gazeuse sur les germes d'alumine solide est lente. Ces derniers ne grossissent alors pas suffisamment pour que le caractère endothermique de leur fusion ait un effet significatif sur le profil de température. Mais la diminution du rapport R_{germe} amène une autre conséquence pour les instants suivants la disparition de l'aluminium. On constate qu'après l'évaporation de l'aluminium, marquée par un changement de pente dans les cas où $R_{germe} = 0,2$ et $R_{germe} = 0,1$, une augmentation progressive de la température du gaz a lieu pour atteindre une température finale avoisinant 3472 K pour l'ensemble des cas. Cette augmentation de température qui ralentit avec la diminution du rapport R_{germe} est liée à la réduction de la surface d'échange qui entraîne une diminution de la vitesse de condensation.

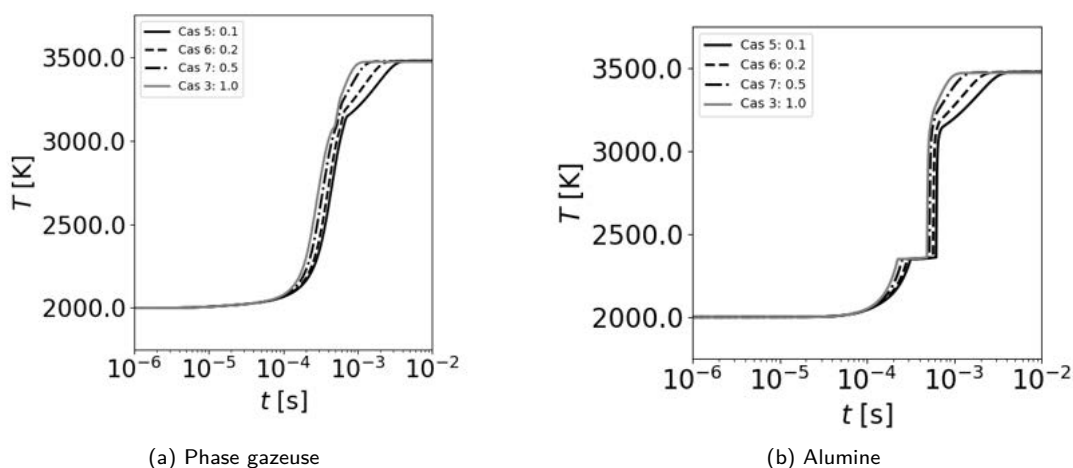


FIGURE 4.13 – Évolution temporelle de la température selon la réduction du rapport R_{germe}

Le rapport R_{germe} a bien une influence sur le déroulement de la combustion des particules d'aluminium avec l'air. Ainsi l'augmentation du nombre de germes d'alumine pour une particule d'aluminium conduit à une augmentation de la surface d'échange qui accélère la condensation et la combustion. Par ailleurs, elle augmente aussi la quantité d'alumine en phase solide qui devra fondre avec l'augmentation de la température, ce qui peut entraîner un refroidissement du gaz à cause de l'énergie thermique nécessaire pour le changement de phase. Le rapport $R_{germe} = 1$ reste un bon compromis pour le cas des particules d'aluminium à $7 \mu\text{m}$.

4.5 Influence de la taille des particules d'aluminium

L'influence de la taille des particules d'aluminium sur la combustion a également été étudiée. Les cas 11 à 15 correspondent ainsi à des simulations réalisées avec des particules de diamètre $3 \mu\text{m}$, $5 \mu\text{m}$, $10 \mu\text{m}$, $15 \mu\text{m}$ et $20 \mu\text{m}$. Ces cas sont comparés avec le cas 3 qui contient des particules d'aluminium d'un diamètre de $7 \mu\text{m}$. Comme dans ce dernier cas, $R_{germe} = 1$ et l'aluminium est en quantité stœchiométrique avec l'air à 2000 K et à pression ambiante. Une analyse plus poussée de l'évolution du diamètre et de la température des particules est faite sur le cas 11 contenant de l'aluminium de taille $3 \mu\text{m}$.

4.5.1 Variation de la taille des particules : Cas 11 à 15

L'augmentation de la taille des particules pour une masse constante d'aluminium conduit à une diminution de la surface d'échange, ce qui ralentit l'évaporation de l'aluminium. Ainsi cette augmentation a une influence sur la vitesse de combustion comme l'illustre la Fig. 4.14 avec l'évolution temporelle de la température du gaz des cas 11 à 15 et 3. Lors de l'augmentation de la taille des particules de $3\ \mu\text{m}$ à $20\ \mu\text{m}$, on retarde l'augmentation de température de 2,4 ms. Mais ce retard n'est pas la seule conséquence du changement de taille des particules d'aluminium. L'augmentation de la taille des particules a une influence sur le profil de température qui peut se rapprocher de ce qui a été observé lors de l'étude de la variation du rapport R_{germe} .

Pour des particules de diamètre supérieur à $7\ \mu\text{m}$, les profils de température sont similaires avec une température finale à $3472\ \text{K}$. En passant d'un diamètre de $7\ \mu\text{m}$ à $10\ \mu\text{m}$, la phase décroissante liée au changement de phase de l'alumine disparaît pour retrouver une augmentation continue de la température pour le second cas. Cette augmentation progressive de la température est liée à la surface d'échange de l'alumine liquide qui n'est pas assez grande pour condenser suffisamment vite l'alumine gazeuse après la disparition de l'aluminium. Cette augmentation progressive de température est d'autant plus lente que le diamètre des particules est grand, comme on le voit lors du passage d'un diamètre de $10\ \mu\text{m}$ à $20\ \mu\text{m}$ (il est à préciser que l'axe des abscisses est en *semi-log*). Cette évolution est liée à une évaporation plus lente de l'aluminium qui permet de laisser le temps à l'alumine de condenser. Ainsi lors de l'évaporation complète de l'aluminium, la quasi-totalité de l'alumine gazeuse a pu être condensée sous forme liquide.

Pour des particules de diamètre inférieur à $7\ \mu\text{m}$, le profil de température a une rupture de pente qui s'accroît avec la réduction de la taille des particules. Cette évolution suit le raisonnement fait lors de l'augmentation du rapport R_{germe} avec $R_{germe} > 1$. En réduisant la taille des particules d'aluminium, la surface d'échange croît ce qui entraîne également une augmentation de la vitesse d'évaporation. Mais en restant à $R_{germe} = 1$, le nombre réel de germes d'alumine présent dans la maille augmente avec le nombre réel de particules d'aluminium. Lors du passage de $7\ \mu\text{m}$ à $3\ \mu\text{m}$, le nombre de germes d'alumine passe de 23,32 à 296,29. La surface d'échange des germes d'alumine augmente en $1/dp^3$ lors de l'augmentation de celle de l'aluminium à $1/dp$ par la variation de la taille des particules d'aluminium. Cette augmentation conduit à une condensation plus rapide de l'alumine dans les premiers instants de la combustion. La masse d'alumine solide à vaporiser est ainsi plus grande lorsque les particules d'aluminium sont plus petites, ce qui provoque un blocage de la chimie et une diminution de la température des gaz à l'équilibre. Ainsi il y a une accentuation de la phase de décroissance de la température et une diminution de la température d'équilibre lors de la réduction de la taille des particules d'aluminium .

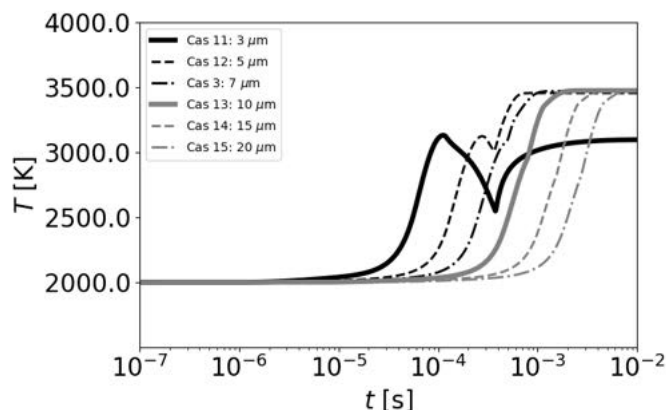


FIGURE 4.14 – Évolution temporelle de la température de la phase gazeuse selon la taille des particules d'aluminium

Le choix physique de prendre comme référence $R_{germe} = 1$ n'a pas d'impact sur la combustion des particules d'aluminium suffisamment grosses. La vitesse d'évaporation est lente vis-à-vis de la vitesse de condensation de l'alumine. Mais pour les cas où la taille des particules d'aluminium est inférieure à $5 \mu\text{m}$, le paramètre $R_{germe} = 1$ a un fort impact sur la combustion des particules.

4.5.2 Particules d'aluminium de petite taille : Cas 11

Un analyse plus précise est faite sur la combustion des particules d'aluminium de $3 \mu\text{m}$. La Fig. 4.15 représente l'évolution de la taille des particules d'aluminium et d'alumine au cours du temps avec l'évolution de leur température. Pour l'évolution de la taille des particules, les profils sont proches de ceux qui ont été observés pour la combustion des particules d'aluminium de $7 \mu\text{m}$ (Fig. 4.6). Le diamètre des particules d'aluminium se réduit progressivement jusqu'à $60 \mu\text{s}$. À cet instant, le changement de phase s'accélère et la totalité des particules est évaporée à $0,11 \text{ ms}$, soit plus de 5 fois plus rapidement que pour le cas 3. La température de l'aluminium augmente durant son évaporation et atteint la température « humide » (terme défini dans la section 3.3.6.2) à $0,10 \text{ ms}$. Lors de l'évaporation de l'aluminium, les réactions de combustion produisent de l'alumine gazeuse qui va pouvoir se condenser sur les germes d'alumine. Le diamètre des particules d'alumine augmente pendant et après l'évaporation de l'aluminium. Ainsi la taille de l'alumine augmente de 1 nm à $3,4 \mu\text{m}$. Mais comme cela a été dit dans les sections précédentes, les particules d'alumine vont changer de phase au cours de la combustion. L'évolution de la température des particules d'alumine suit celle du gaz dans les premiers instants jusqu'à atteindre la température de fusion de l'alumine. À partir de cet instant, les particules d'alumine accumulent de l'énergie nécessaire pour la fusion et un blocage de la chimie a lieu. Ce changement de phase dure $0,34 \text{ ms}$, soit plus de 3 fois plus longtemps que l'évaporation de l'aluminium. Ainsi ces particules d'alumine, avec une taille non négligeable à cet instant, vont être bloquées à une température plus faible que celle du gaz et vont absorber une partie de sa chaleur. Une fois le changement de phase réalisé, la température des particules d'alumine s'équilibre avec celle du gaz à 3124 K .

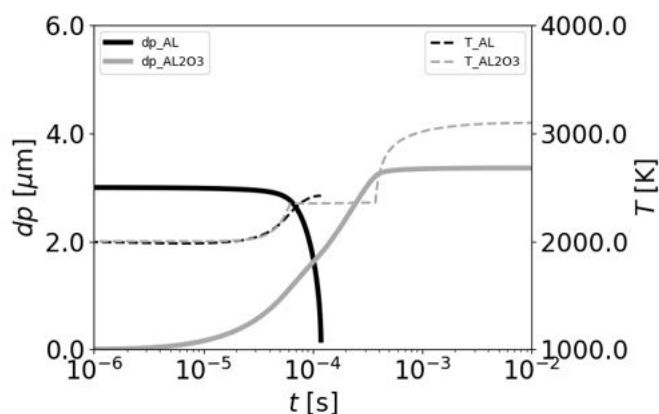


FIGURE 4.15 – Évolution temporelle de la température et de la taille des particules d'aluminium et d'alumine au cours du temps

Les cas contenant des particules de diamètre $3 \mu\text{m}$ et $7 \mu\text{m}$ ont été comparés. La Fig. 4.16 représente l'évolution temporelle de la température et du diamètre des particules d'alumine pour les différents cas. Le diamètre des particules d'alumine est plus grand pour le cas 3 que pour le cas 11 en fin de combustion. Cette différence est liée au nombre de germes présents dans la maille qui est plus important pour le cas 11 que pour le cas 3. De même, la vitesse de condensation de l'alumine est plus rapide pour le cas 11 que pour le cas 3. Cette accélération est due à la différence de surface d'échange qui est plus importante pour le cas 11 que pour le cas 3 ce qui permet de condenser plus rapidement l'alumine dans le gaz et d'éviter une accumulation de celle-ci, comme il a été observé dans le cas 3. Mais le fait que l'alumine gazeuse se condense rapidement sur

la particule solide d'alumine conduit à la fusion d'une plus grande quantité d'alumine lorsque sa température atteint la température de fusion et du blocage de la chimie diminue la chaleur dégagée par les réactions. La masse d'alumine qui passe de l'état solide à l'état liquide peut être relevée en récupérant le diamètre des particules d'alumine à la fin de la fusion. Ainsi pour le cas à $7\ \mu\text{m}$, la fusion dure $0,26\ \text{ms}$ et concerne $1,87\ \text{ng}$ répartis en $23,32$ particules. Or pour le cas à $3\ \mu\text{m}$, la fusion dure $0,38\ \text{ms}$ et concerne $15,186\ \text{ng}$ répartis en $296,29$ particules, soit une masse $8,12$ fois plus grande que celle du cas 3. La masse étant plus grande, l'énergie nécessaire à la fusion est aussi plus grande et sera prélevée à la phase gazeuse lors de l'évaporation de l'aluminium.

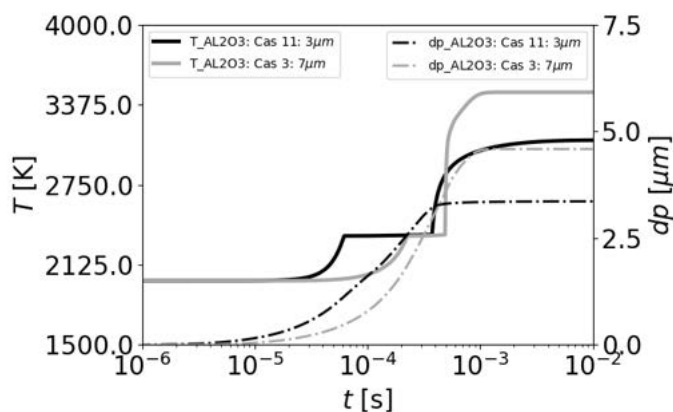


FIGURE 4.16 – Évolution temporelle de la température et de la taille des particules d'alumine au cours du temps pour les cas 3 et 11

4.6 Conclusion sur la combustion 0D

Dans un premier temps, l'étude de la combustion de l'aluminium avec l'air uniquement en phase gazeuse a permis d'obtenir des résultats proches de ceux obtenus par un calcul d'équilibre thermodynamique fait avec Cantera. Le temps de combustion obtenu est largement supérieur à ceux de l'évaporation des particules d'aluminium ou de la condensation sur les germes d'alumine. La cinétique de combustion dépend de l'évaporation, c'est un fait physique, et donc sa modélisation va être très dépendante du modèle d'évaporation choisi, ce qui a une conséquence sur la modélisation.

La modélisation de la combustion d'une particule de $7\ \mu\text{m}$ a montré que la température en fin de combustion et le temps de combustion qui en résultent sont proches des valeurs de la littérature. On retrouve une évaporation croissante de l'aluminium qui accélère avec la température du gaz. À partir d'un certain délai, des réactions très exothermiques s'activent et augmentent rapidement la température du gaz. Pendant ce temps, l'alumine gazeuse se condense et se solidifie sur les germes initialement introduits dans la maille. La vitesse de condensation est limitée par rapport à la vitesse de formation de l'alumine en phase gazeuse. Une fois la surface d'échange suffisamment grande, la vitesse de condensation dépasse celle de formation de l'alumine et sa fraction massique dans la phase gazeuse va diminuer avec le temps. Mais la température de l'alumine solide étant égale à celle du gaz, celle-ci va atteindre sa température de fusion après un certain délai. À cet instant, l'alumine solide va fondre pendant une certaine durée qui correspond à celle permettant l'accumulation de la chaleur nécessaire au changement de phase. Une fois en phase liquide, la température de l'alumine s'équilibre avec celle du gaz. À la fin de l'évaporation de l'aluminium, l'alumine continue à se condenser et à consommer l'alumine gazeuse. D'autres réactions ont lieu jusqu'à ce que la phase gazeuse atteigne l'équilibre et produiront d'avantage d'alumine. Un schéma récapitulatif de la combustion diphasique de l'aluminium est fait en Fig. 4.17

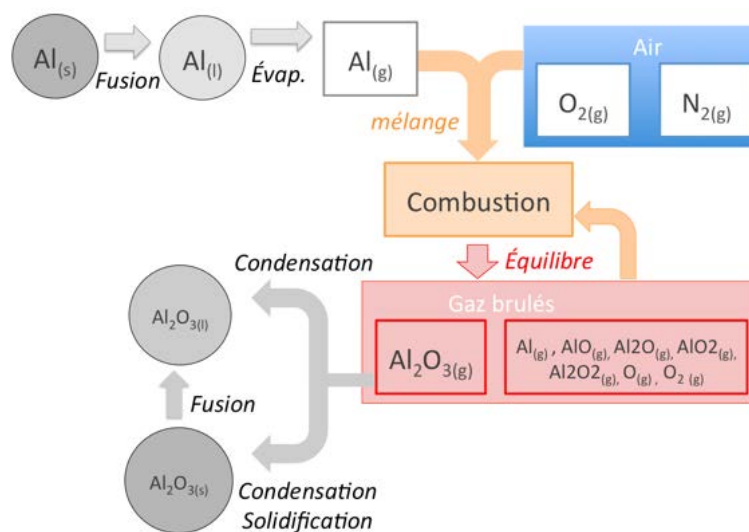


FIGURE 4.17 – Schéma de la combustion diphasique de l'aluminium avec l'air

La condensation de l'alumine joue un rôle important sur la combustion de l'aluminium. Des cas avec et sans germes d'alumine ont été faits. Ils ont montré que la chaleur dégagée par la condensation de l'alumine ne peut pas être négligée et permet de gagner plusieurs centaines de Kelvin en fin de combustion. En l'absence d'un modèle complexe de nucléation, l'injection des germes d'alumine est faite avec un rapport R_{germe} du nombre de germes d'alumine par particule d'aluminium égal à 1. L'influence de ce paramètre a donc été analysée en réalisant des simulations pour différentes valeurs. Cette étude a montré que lors de l'augmentation du rapport R_{germe} , la surface d'échange de l'alumine augmente et conduit à l'accélération de sa condensation. Les particules d'alumine sont plus grosses lors de la fusion, ce qui provoque une augmentation de la durée de changement de phase. Durant cet intervalle de temps, les particules restent bloquées à la température de fusion et refroidissent le gaz à cause de la chaleur nécessaire au changement de phase. Au contraire, dans les cas où R_{germe} diminue, la vitesse de condensation diminue et l'alumine change de phase avant l'évaporation totale de l'aluminium. Mais la diminution de la vitesse de condensation conduit à une évolution douce et continue de la température du gaz après la disparition de l'aluminium. Ainsi $R_{germe} = 1$, est un bon compromis entre une surface d'échange de l'alumine pas trop faible pour avoir une vitesse de condensation suffisamment forte pour consommer l'alumine en phase gazeuse, mais pas trop grande pour éviter d'avoir une trop grande masse d'alumine à faire fondre.

Ce rapport $R_{germe} = 1$ a été utilisé pour plusieurs cas pour lesquels la taille des particules a été choisie entre $3\ \mu\text{m}$ et $20\ \mu\text{m}$. Des effets similaires à ceux observés en faisant varier R_{germe} ont été obtenus dans certains cas. Pour les particules d'aluminium de taille supérieure ou égale à $5\ \mu\text{m}$, on observe une combustion qui ralentit avec l'augmentation de la taille des particules d'aluminium. Cette évolution est en accord avec le fait que si les particules sont plus grosses pour une masse constante d'aluminium dans la maille, la vitesse d'évaporation va diminuer à cause de la diminution de la surface d'échanges des particules d'aluminium. Mais pour les particules d'aluminium de taille inférieure à $5\ \mu\text{m}$, le changement de phase de l'alumine pose des problèmes. Comme pour le cas $R_{germe} = 10$ avec des particules de $7\ \mu\text{m}$, le nombre de germes d'alumine est trop grand dans la maille. La surface d'échange est suffisamment grande pour permettre une condensation et une solidification importante de l'alumine gazeuse. Les particules d'alumine vont prélever trop d'énergie au gaz et bloquer la chimie, ce qui conduira à refroidir davantage le gaz.

Le nombre de germes d'alumine injectés pour une particule d'aluminium est un paramètre important pour la modélisation de la combustion mise en place. Des phénomènes limitants sont observés si le nombre de germes d'alumine est trop grand dans la maille. Si on reste à $R_{germe} = 1$, un choix physique qui illustre l'existence d'un lobe nanométrique sur chaque goutte d'aluminium, la modélisation de la combustion d'aluminium est

raisonnable pour des particules dont la taille est supérieure ou égale à $5\ \mu\text{m}$. Les prochaines simulations du chapitre 5 seront des flammes 1D aluminium-air où l'influence de nombreux paramètres d'entrée sera étudiée comme la taille des particules, la richesse et la température des gaz frais avec $R_{germe} = 1$. L'effet du rapport R_{germe} sera à nouveau étudié, cette fois-ci dans le contexte d'une flamme 1D.

Chapitre 5

Étude numérique 1D de flammes aluminium-air

Ce chapitre est consacré à l'analyse des flammes diphasiques 1D entre l'aluminium et l'oxygène de l'air. Ces études permettront d'évaluer les caractéristiques et la composition des flammes en fonction de plusieurs paramètres comme la température initiale des gaz frais et des particules, la taille des particules et la richesse. De même, l'influence des paramètres numériques a été étudiée comme le nombre de particules suivies par maille et le rapport R_{germe} entre le nombre de germes d'alumine et le nombre de particules d'aluminium. Les résultats sur la température et la vitesse de flamme seront comparés à ceux trouvés dans la littérature et présentés dans le chapitre 1. Comme pour les cas 0D présentés dans le chapitre 4, une analyse sera faite sur l'effet de l'évolution des vitesses d'évaporation et de condensation sur la flamme 1D. Ces éléments imposeront des limites sur l'utilisation du modèle de combustion diphasique mis en place.

5.1 Mise en place des simulations 1D

5.1.1 Cas d'étude

Ce chapitre présentera 50 cas de flammes diphasiques 1D. L'ensemble de ces cas sont présentés dans le tableau 5.1. Le cas 1 est la flamme de référence pour cette étude. Cette flamme est stœchiométrique avec des particules d'aluminium de 7 μm de diamètre. La température initiale des gaz frais et des particules, T_i , est de 300 K. Pour la majorité des cas, le nombre de particules virtuelles $N_{v,*}$ est défini pour avoir un nombre de particules suivies $N_{s,*}$ égale à 5 particules par maille, sauf pour les cas 1 et 18-20 où $N_{s,*}$ est augmenté. Dans les gaz frais, le nombre de germes d'alumine N_g par maille est égal au nombre de particules d'aluminium N_p par maille, d'où $R_{germe} = 1$. Le cas de référence est réalisé avec un maillage plus fin que celui utilisé pour les autres simulations. La comparaison du cas de référence avec le cas 2 permettra d'évaluer l'indépendance au maillage sur le maillage le moins résolu. Ce maillage moins résolu est alors utilisé sur les autres cas d'étude pour gagner en temps de calcul. Une étude sur l'influence du rayonnement est faite grâce au cas 3 dans lequel il n'est pas pris en compte. Pour les paramètres d'entrée, des études sur l'influence de la richesse et de la taille de particules sont faites respectivement avec les cas 4-7 et 8-11. La température initiale T_i des gaz frais est le dernier paramètre dont l'influence est étudiée avec les cas 12-14 et 15-17 où la richesse varie de 0,64 à 1,00. Ensuite des études sur les paramètres numériques sont faites. Les cas 18-20 permettent d'étudier l'effet de l'augmentation du nombre de particules suivies $N_{s,*}$ par maille dans les gaz frais en passant leur valeur de 10 à 25 puis 50. Les cas 21-50 font varier la taille des particules d'aluminium de 3 μm à 15 μm et le rapport R_{germe} de 0,1 à 10,0. Pour l'ensemble des cas, les flammes sont stationnaires. Ainsi la vitesse d'injection des gaz frais et des particules est égale à la vitesse de la flamme qui a été mesurée pour ces différents cas d'étude.

TABLE 5.1 – Ensemble des cas de flamme diphasique 1D avec des particules d'aluminium et des germes d'alumine (En gras : Cas de référence pour les études 1D)

Cas	T_i [K]	Ray.	Φ	d_p [μm]	$N_{s,*}$	R_{germe}
1	300	oui	1,00	7	20	1,0
2	300	oui	1,00	7	5	1,0
3	300	non	1,00	7	5	1,0
4-5-6-7	300	oui	[0,64 ; 0,85 ; 1,45 ; 2,02]	7	5	1,0
8-9-10-11	300	oui	1,00	[3 ; 5 ; 10 ; 15]	5	1,0
12-13-14	700	non	[0,64 ; 0,85 ; 1,00]	7	5	1,0
15-16-17	1000	non	[0,64 ; 0,85 ; 1,00]	7	5	1,0
18-19-20	300	oui	1,00	7	[10 ; 25 ; 50]	1,0
21-22-23-24-25	300	non	1,00	[3 ; 5 ; 7 ; 10 ; 15]	5	0,1
26-27-28-29-30	300	non	1,00	[3 ; 5 ; 7 ; 10 ; 15]	5	0,2
31-32-33-34-35	300	non	1,00	[3 ; 5 ; 7 ; 10 ; 15]	5	0,5
36-37-38-39-40	300	non	1,00	[3 ; 5 ; 7 ; 10 ; 15]	5	2,0
41-42-43-44-45	300	non	1,00	[3 ; 5 ; 7 ; 10 ; 15]	5	5,0
46-47-48-49-50	300	non	1,00	[3 ; 5 ; 7 ; 10 ; 15]	5	10,0

5.1.2 Domaine de calcul

Les cas d'étude sont réalisés dans un domaine de calcul 1D de longueur 20 mm. L'air et les particules sont injectés à gauche du domaine, puis les gaz brûlés et les particules d'alumine sortent à droite. Ce domaine est maillé de deux façons différentes avec des mailles alignées sur la longueur du domaine et d'une hauteur de 5 mm. Le premier maillage, appelé maillage résolu, est composé de 1000 mailles alors que le second maillage n'en comprend que 400. Ce dernier maillage, qui est illustré en Fig. 5.1, est celui qui sera utilisé pour la majorité des cas d'étude. Le maillage fin est uniquement utilisé pour l'étude de la flamme aluminium-air de référence.

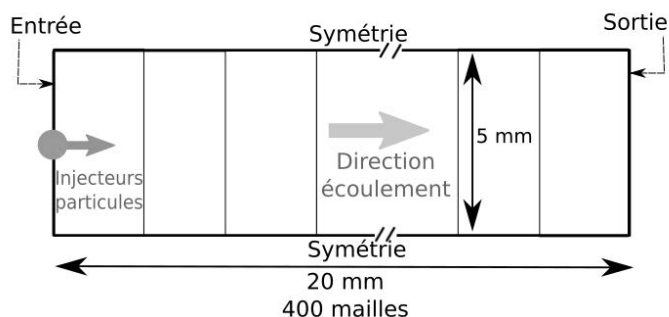


FIGURE 5.1 – Schéma du domaine de calcul pour la flamme diphasique 1D aluminium-air

À l'entrée, la condition à la limite impose un vecteur vitesse, la composition et la température des gaz frais. Des injecteurs de particules sont positionnés au centre de cette limite du domaine et permettent d'injecter des particules d'aluminium et des germes d'alumine. Ces injecteurs sont définis avec un débit massique, une vitesse et un diamètre de particule. À la sortie du domaine, la condition à la limite impose une pression de 1 bar. Les particules sortent du domaine par la droite. Pour les conditions aux limites sur les parties supérieure et inférieure, une condition de symétrie est établie pour permettre une étude 1D.

Les particules sont des points virtuels assimilés à des sphères. La richesse donnée est contrôlée en imposant un flux de particules au niveau de l'entrée.

5.1.3 Initialisation de la flamme 1D

L'initialisation de la flamme diphasique 1D aluminium-air est plus complexe que pour le cas d'une simple flamme gazeuse. L'aluminium doit être suffisamment chauffé pour s'évaporer et fournir le débit de combustible nécessaire pour entretenir la flamme. Ainsi la simulation est initialisée en découpant le domaine en deux parties comme cela est présentée en Fig. 5.2. La partie de gauche contient de l'air et des particules d'aluminium accompagnées de germes d'alumine à une température T_i . La partie de droite contient un gaz à haute température, 3500 K pour notre étude. Cette partie du domaine est composée d'azote, qui est une espèce gazeuse passive du schéma réactionnel. Ainsi, aucune réaction ne peut avoir lieu dans cette zone. Entre les deux domaines, la température augmente progressivement de la température des gaz frais à celle des gaz chauds dans une zone de transition d'épaisseur définie par l'utilisateur. Les particules d'aluminium chauffent et s'évaporent dans la zone de transition entre les deux domaines. La flamme 1D apparaît et forme des produits de combustion avec une vitesse plus importante que la vitesse initiale du fluide. La flamme se déplace vers l'entrée du domaine tout en produisant des produits de combustion qui se déplacent vers la sortie. La tranche contenant l'espèce passive va progressivement sortir du domaine de calcul jusqu'à totalement disparaître.

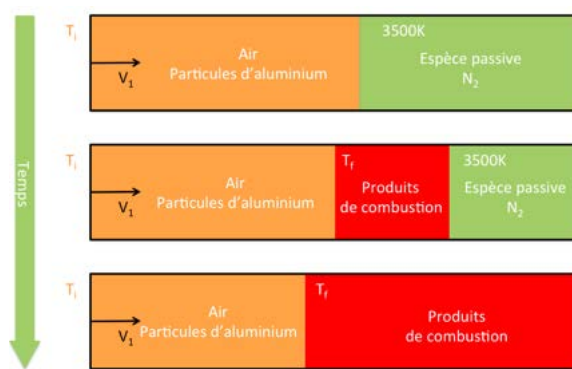


FIGURE 5.2 – Schéma de l'initialisation de la flamme diphasique 1D

La simulation ne peut pas être initialisée avec une température des gaz frais trop basse à cause des trop grands gradients de température, vitesse et taux de dégagement de chaleur qui interviennent dans les premiers instants. Pour obtenir une flamme à $T_i = 300$ K, il est nécessaire de diminuer T_i progressivement de 1000 K à 300 K. La Fig. 5.3 illustre la démarche entreprise lors de la réduction de T_i . En réduisant la température T_i , la vitesse et le débit d'injection des particules sont diminués pour compenser le ralentissement de la flamme et rester en conditions stœchiométriques. Le nouvel état d'équilibre de la flamme correspondant à la nouvelle température des gaz frais est obtenu une fois que les produits de combustion de cette nouvelle flamme ont atteint la sortie du domaine. Cette démarche est répétée jusqu'à obtenir une flamme stable alimentée par des gaz frais à 300 K. Pour chacun des cas, cette démarche est intégralement mise en œuvre en adaptant les valeurs des paramètres physiques ou numériques.

5.2 Flamme 1D stœchiométrique de référence : Cas 1

Cette simulation 1D de flamme aluminium-air est faite avec des particules d'aluminium de taille $7 \mu\text{m}$ et de l'air à 300 K à pression ambiante. Le maillage utilisé est celui contenant 1000 mailles. La flamme est stœchiométrique et le débit d'aluminium, calculé en fonction de la réaction globale de formation de l'alumine, vaut $0,397 \text{ g}\cdot\text{s}^{-1}$. Pour s'assurer de la présence d'au moins une particule suivie par maille derrière la flamme, le nombre de particules virtuelles par particule suivie est de $N_{v,p} = 2433,9$ pour avoir 20 particules d'aluminium suivies par maille dans les gaz frais. Le débit d'alumine injectée est de $1,07 \text{ pg}\cdot\text{s}^{-1}$ et le nombre de particules virtuelles par particule suivie est $N_{v,g} = N_{v,p} = 2433,9$, soit un germe d'alumine pour une particule d'aluminium ($R_{germe} = 1$). Cette flamme du cas 1 est considérée comme la flamme de référence pour l'ensemble des autres cas d'étude 1D. Mais le maillage utilisé est très fin et le nombre de particules suivies $N_{s,*}$ par maille est très

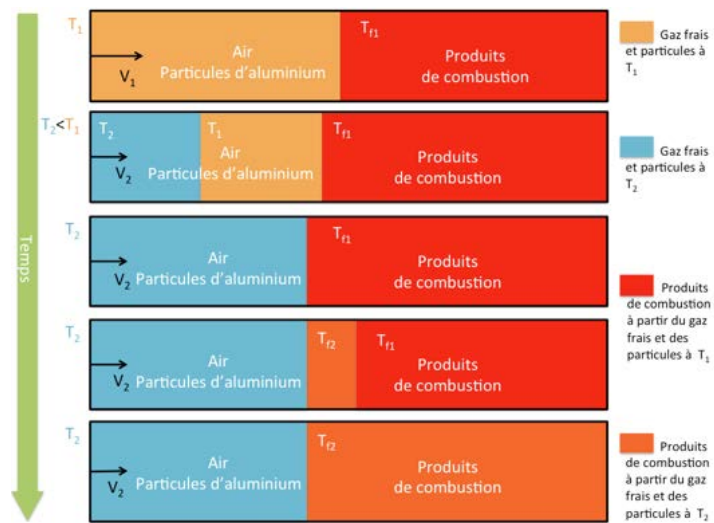


FIGURE 5.3 – Schéma de l'initialisation de la flamme disphasique 1D lors de la réduction de la température T_i

grand, ce qui conduit à un lourd coût de calcul pour obtenir des flammes 1D avec des propriétés identiques. Ainsi le cas 2 utilisera le maillage contenant 400 mailles, tout en réduisant le nombre $N_{s,*}$ à 5 particules suivies par maille. Pour finir, le cas 3 mettra en évidence l'effet du rayonnement des particules d'alumine sur la flamme 1D.

5.2.1 Structure de la flamme

Le profil de température de la phase gazeuse et l'évolution de la taille des particules d'aluminium et d'alumine à travers la flamme sont représentés en Fig. 5.4. Initialement, les particules d'aluminium et les germes d'alumine ont respectivement une taille de $7\ \mu\text{m}$ et $1\ \text{nm}$. À l'approche de la flamme, les particules d'aluminium s'évaporent et fournissent le combustible en phase gazeuse qui alimente la flamme. L'aluminium s'évapore rapidement à cause des fortes températures et de la consommation de l'aluminium gazeux, pour totalement s'évaporer $1,42\ \text{mm}$ en aval du front de flamme. Ce front de flamme s'identifie sur la courbe de température comme étant la position de son gradient maximum. Le germe d'alumine voit sa taille augmenter rapidement après avoir traversé le front de flamme. Cette augmentation est due à la condensation de l'alumine produite par la flamme. La taille des particules d'alumine augmente rapidement pendant l'évaporation de l'aluminium jusqu'à atteindre la taille de $5,59\ \mu\text{m}$ lors de la disparition de l'aluminium. À partir de $1,42\ \text{mm}$ derrière le front de flamme, l'alumine liquide continue à permettre la condensation progressive de l'alumine gazeuse produite dans les gaz brûlés, jusqu'à l'équilibre. La température du gaz augmente de $\Delta T = 295\ \text{K}$, ce qui permet d'obtenir une température de flamme T_f à $3375\ \text{K}$.

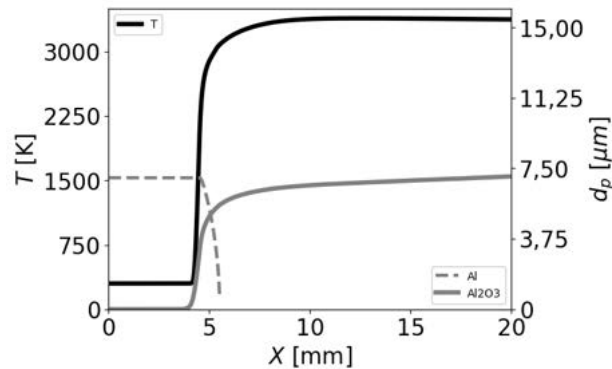


FIGURE 5.4 – Profil de température et évolution du diamètre des particules d'aluminium et des germes d'alumine à travers la flamme

L'évolution du taux de dégagement de chaleur à travers la flamme et de la taille des particules sont représentées sur la Fig. 5.5. Dans le front de flamme, le taux de dégagement de chaleur \dot{w}_T atteint un maximum à $3,62 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$. Cette valeur est grande et provoque un gradient important au niveau du front de flamme. Cette forte augmentation du taux de dégagement de chaleur signale que des réactions très exothermiques ont lieu. Or un peu en amont du dégagement de chaleur, les particules d'alumine voient leur taille augmenter grâce à la condensation de l'alumine gazeuse produite par le début de réaction de l'aluminium. Dans cette zone, l'évaporation de l'aluminium est faible, peu d'alumine gazeuse est produite et peu d'énergie est dégagée par les réactions chimiques. Ainsi la variation du diamètre de l'aluminium et du taux de dégagement de chaleur est très faible dans cette zone, contrairement à celle du diamètre des particules d'alumine qui est marquée par une augmentation. Après le saut du taux de dégagement de chaleur, celle-ci diminue fortement pour avoisiner $1,41 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ dans la majeure partie de la flamme. Lorsque l'aluminium est entièrement évaporé, le taux de dégagement de chaleur chute pour avoir une valeur négative de $-0,18 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ puis augmente progressivement pour tendre vers 0. Cette inversion de \dot{w}_T est liée aux réactions de combustion qui s'équilibrent en produisant de l'alumine gazeuse qui se condense à son tour sur les gouttes d'alumine. Ainsi, ces réactions étant endothermiques, la valeur du taux de dégagement de chaleur est négative dans les gaz brûlés et tend vers 0 en s'éloignant du front de flamme.

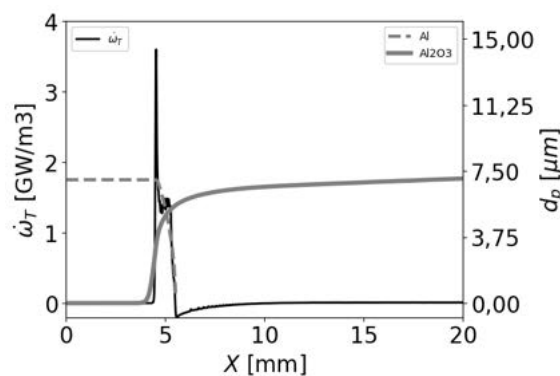


FIGURE 5.5 – Profil du taux de dégagement de chaleur et évolution du diamètre des particules d'aluminium et des germes d'alumine à travers la flamme

L'évolution de la température des particules et de leur taille à travers la flamme est représentée sur la Fig. 5.6. Initialement les particules d'aluminium et les germes d'alumine sont sous la forme solide à 300 K. À l'approche de la flamme, l'aluminium solide chauffe et ne s'évapore qu'après avoir atteint sa température de fusion à 933 K et accumulé assez d'énergie thermique pour changer de phase. Ce changement de phase a lieu à $x = 4,35$ mm, mais il n'est pas visible sur la figure à cause de la faible quantité d'énergie nécessaire pour la fusion. Une fois liquide, l'aluminium commence à s'évaporer. Ainsi la température de la goutte d'aluminium continue à augmenter jusqu'à son évaporation totale. Comme l'aluminium, l'alumine solide chauffe à l'approche du front de flamme. Mais contrairement à l'évaporation, la condensation et la solidification de l'alumine gazeuse ont lieu même lorsque le germe d'alumine est sous forme solide. Ainsi le diamètre de la particule d'alumine augmente avant que celle-ci n'atteigne sa température de fusion à 2370 K. À cette température, l'alumine change de phase et accumule de la chaleur. Mais cette fusion demande plus d'énergie que celle demandée pour l'aluminium. Un palier de température de la particule d'alumine a lieu. Après ce changement de phase, la goutte d'aluminium continue à chauffer et atteint la température des gaz brûlés. La montée en température des particules est presque identique à celle du gaz grâce à leur petite taille. Un léger refroidissement des gouttes d'alumine peu être constaté sur la figure à cause de la perte de chaleur par rayonnement.

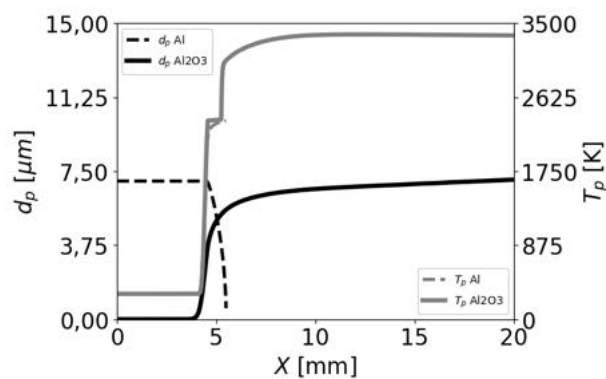


FIGURE 5.6 – Évolution du diamètre et de la température des particules d'aluminium et des germes d'alumine à travers la flamme

Les évolutions de la vitesse U de la phase gazeuse et du taux de chaleur dégagé par les réactions de combustion à travers la flamme sont représentées sur la Fig. 5.7. La vitesse de la flamme est mesurée à $27,1 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. La quantité de mouvement ρU se conservant à travers une flamme, la vitesse U augmente pour atteindre un maximum de $3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Cette vitesse diminue progressivement avec le refroidissement des gouttes d'alumine par rayonnement.

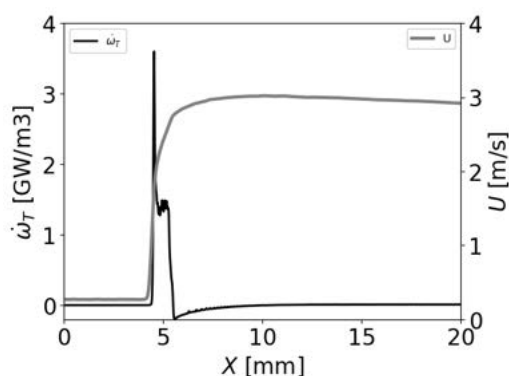


FIGURE 5.7 – Évolution de la vitesse U de la phase gazeuse et du taux de dégagement de chaleur par les réactions de combustion à travers la flamme

5.2.2 Composition de la flamme

L'évolution de la composition de la phase gazeuse à travers la flamme est représentée sur la Fig. 5.8. Comme pour le cas 0D, les réactions sont rapides et l'aluminium gazeux est consommé presque instantanément au niveau du front de flamme pour produire majoritairement de l'alumine gazeuse. Mais les germes sont alors très petits et l'alumine gazeuse se condense lentement. Cette espèce s'accumule dans la phase gazeuse et atteint $Y_{\text{Al}_2\text{O}_3}=0,062$ à $x=4,51$ mm avec une diminution de la fraction massique d'oxygène de $\Delta Y_{\text{O}_2}=0,082$. À partir de cet instant, d'autres réactions s'activent et produisent massivement d'autres oxydes d'aluminium comme Al_2O_2 avec un pic de fraction massique à $Y_{\text{Al}_2\text{O}_2}=0,148$. Ces réactions sont la cause du saut du taux de dégagement de chaleur observé précédemment et augmentent rapidement la température du gaz. Cette augmentation conduit à une vitesse d'évaporation plus grande et à une consommation plus importante de l'aluminium. Par ailleurs, ces réactions semblent consommer l'aluminium gazeux en faveur de la production de Al_2O_2 . Mais après l'évaporation totale de l'aluminium à $x=5,2$ mm, la production de Al_2O_2 s'arrête et il est consommé pour produire les oxydes AlO , Al_2O et de l'alumine. L'aluminium est aussi produit derrière le front de flamme. Ainsi la composition des gaz brûlés tend dans un premier temps vers un équilibre correspondant à celui d'une combustion adiabatique. Or le refroidissement par rayonnement de l'alumine diminue la température de la phase gazeuse et pousse l'équilibre vers une consommation des oxydes d'aluminium en faveur de la production d'alumine qui se condense.

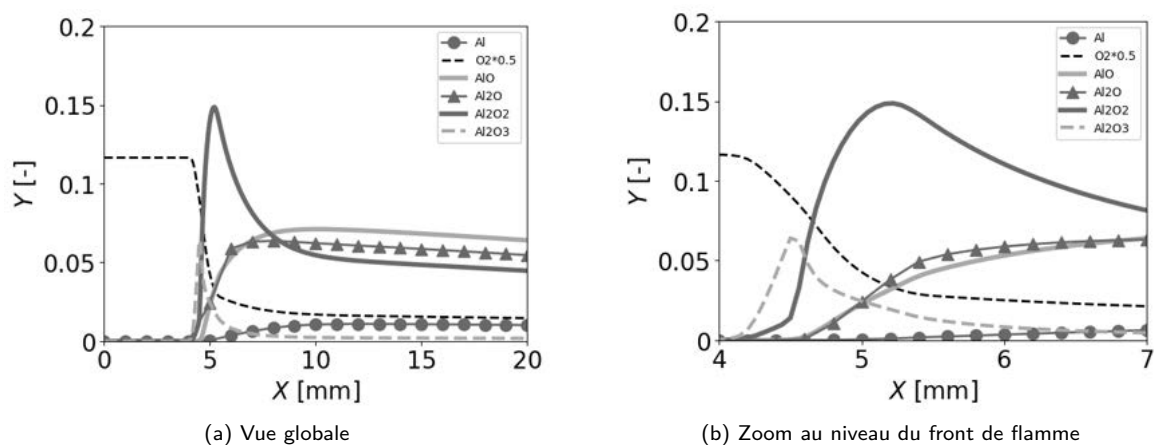


FIGURE 5.8 – Composition de la phase gazeuse à travers la flamme

La Fig. 5.9 représente l'évolution de la taille des particules superposée avec les profils des fractions massiques de l'aluminium et de l'alumine dans le gaz à travers la flamme. La fraction massique de l'aluminium gazeux reste très proche de zéro tout au long de son évaporation. Les réactions sont trop rapides et ne permettent pas à l'aluminium de rester en phase gazeuse. Mais après l'évaporation complète de l'aluminium, l'aluminium gazeux est produit pour atteindre un équilibre. Pour l'alumine, on distingue l'influence de la vitesse de condensation. Au début, les germes d'alumine sont trop petits et la vitesse de condensation est trop faible pour permettre la condensation de la totalité de l'alumine gazeuse. Ainsi, comme il a été dit précédemment, l'alumine gazeuse s'accumule dans le gaz jusqu'à sa condensation et l'activation d'autres réactions la produisant. Lorsque ces réactions s'arrêtent à cause de l'évaporation totale de l'aluminium, l'alumine gazeuse continue à être consommée par condensation. La goutte d'alumine étant suffisamment grande, la condensation est assez rapide pour faire disparaître l'alumine gazeuse à mesure qu'elle se forme.

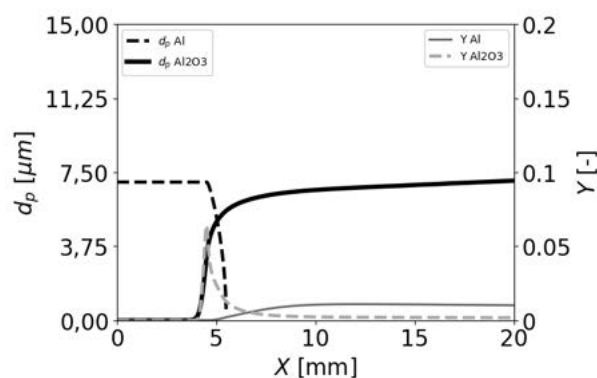


FIGURE 5.9 – Évolution de la taille des particules et de la fraction massique de l'aluminium gazeux et de l'alumine gazeuse à travers la flamme

La Fig. 5.10 illustre l'évolution de la fraction molaire de l'aluminium présent dans la phase gazeuse et la phase liquide. Cette fraction molaire est le rapport du nombre de moles de l'étude sur le nombre de moles totale d'aluminium dans la maille. Les paramètres $X_{Al(l,s)}$ et $X_{Al_2O_3(l)}$ sont respectivement l'évolution des fractions molaires de l'aluminium liquide et de l'aluminium présent dans l'alumine liquide. La fraction molaire d'aluminium liquide va diminuer et tendre vers zéro grâce à son évaporation dans la flamme. L'alumine gazeuse se condense dès son apparition en aval du front de flamme ce qui augmente la fraction molaire de la phase liquide dans les gaz brûlés. Le paramètre X_g représente la fraction molaire de l'aluminium gazeux présent dans l'aluminium et les oxydes d'aluminium en phase gazeuse. Comme il a été vu précédemment, des réactions s'activent pour former des oxydes d'aluminium tout en consommant l'aluminium qui vient de s'évaporer. La fraction molaire X_g augmente rapidement dans le front de flamme, puis diminue en aval de la flamme car les oxydes d'aluminium sont consommés pour produire de l'alumine gazeuse qui finit par se condenser. Au niveau des gaz brûlés, les courbes de $X_{Al_2O_3(l)}$ et X_g présentent des oscillations essentiellement causées par le nombre de particules suivies par maille. L'accélération du gaz à travers la flamme réduit l'homogénéité des gouttes d'alumine derrière la flamme. La concentration d'alumine liquide varie alors d'une maille à l'autre et a des conséquences sur sa condensation. Le paramètre $X_{Al,tot}$ représente la fraction molaire de l'aluminium de toutes les espèces gazeuses et liquides contenant de l'aluminium. Son invariance à travers la flamme vérifie que les changements de phase et la chimie ne conduisent à aucune perte numérique de matière.

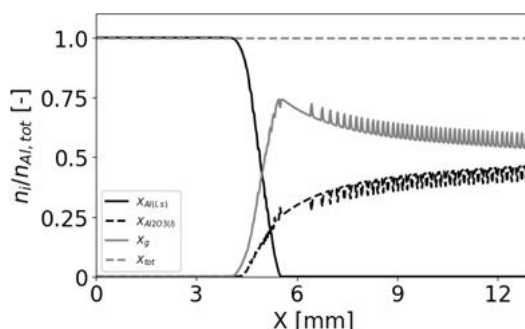


FIGURE 5.10 – Évolution de la fraction molaire de l'aluminium liquide et de l'aluminium présent dans l'ensemble des espèces gazeuses et dans l'alumine liquide à travers la flamme

5.2.3 Influence de la résolution du maillage : Cas 2

Le cas 1 a été réalisé avec un maillage fin et avec un grand nombre de particules suivies $N_{s,*}$ par maille. Or, cette configuration rend les calculs coûteux ce qui ne permet pas de garder les mêmes réglages en géométrie 2D ou 3D, notamment pour les simulations présentées au chapitre 6. Ainsi le cas 2 est similaire au cas 1 mais le maillage utilisé contient 400 mailles et seules 5 particules sont suivies par maille. Les Figs. 5.11 (a) et (b) représentent les profils de température et du taux de dégagement de chaleur \dot{w}_T à travers la flamme respectivement pour les maillages contenant 1000 mailles et 400 mailles. Le changement de maillage et la réduction du nombre de particules suivies par maille, $N_{s,*}$, n'influencent pas la vitesse de flamme qui reste à $27,1 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. De même, le profil de température n'est pas altéré et la température de flamme T_f est de 3375 K pour les deux cas. Une modification du profil du taux de chaleur dégagée par les réactions peut être observée. Pour le cas avec le maillage le plus fin et 20 particules suivies par maille, le profil du taux de dégagement de chaleur \dot{w}_T atteint un maximum $3,62 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ et se stabilise autour de $1,41 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ durant la majeure partie de l'évaporation de l'aluminium. Or pour le cas 2, le profil du taux de dégagement de chaleur \dot{w}_T atteint un maximum de $3,30 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$, mais oscille fortement autour de $1,29 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ durant la majeure partie de l'évaporation de l'aluminium. Ces oscillations s'expliquent par la diminution du nombre de particules suivies par maille derrière le front de flamme. Avec l'accélération de la phase gazeuse dans la flamme, le nombre de particules varie fortement d'une maille à l'autre à cause de la diminution de $N_{s,*}$ et de l'augmentation de la taille de la maille. Ainsi comme les particules suivies contiennent 10 fois plus de particules virtuelles dans le cas 2 que dans le cas 1, la combustion des particules d'aluminium dégage de la chaleur de façon moins uniforme au niveau de la flamme.

Ce maillage moins fin et le passage du nombre de particules suivies $N_{s,*}$ par maille à 5 n'influencent pas les caractéristiques de la flamme. Ainsi cette configuration est utilisée pour la suite des cas d'étude et permet une réduction du coût de calcul.

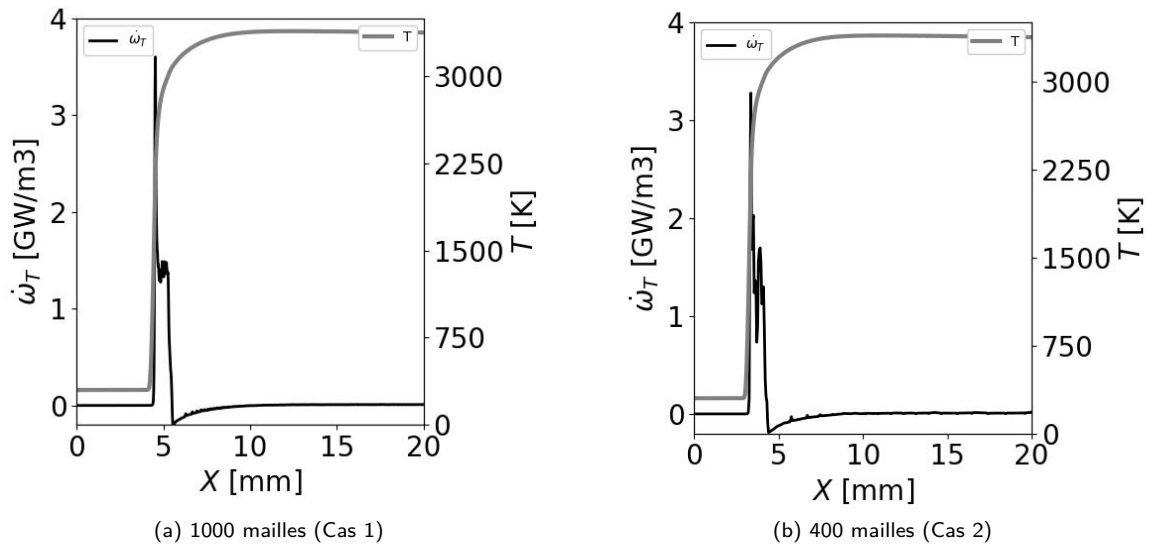


FIGURE 5.11 – Profil de température du gaz et du taux de dégagement de chaleur à travers la flamme

5.2.4 Effet du rayonnement : Cas 3

Le cas 3 est un cas d'étude identique au cas 2, mais sans rayonnement des gouttes d'alumine. La comparaison des 2 cas permet de mettre en avant l'influence du rayonnement sur la flamme aluminium-air. La Fig. 5.12 (a) illustre la superposition des profils de température du cas 2 et du cas 3. La Fig. 5.12 (b) représente la différence de température des profils du cas 3 sur le cas 2. Les évolutions de la température du gaz sont proches pour les deux cas, mais elles présentent quelques différences. La première se situe peu après le front de flamme où la température atteint plus rapidement la température de flamme de 3375 K pour le cas sans rayonnement que pour le cas avec rayonnement. Cette différence est donc liée à la perte thermique due au rayonnement. Une deuxième différence se situe loin du front de flamme. Les gaz brûlés se refroidissent à cause du rayonnement qui diminue la température des gouttes d'alumine.

Le rayonnement a une influence sur la composition de la phase gazeuse. Pour illustrer cette influence, la composition du gaz pour les cas 2 et 3 est représentée respectivement sur les Figs. 5.13 (a) et (b). Tout comme pour les profils de température, les différences se situent près du front de flamme et derrière celui-ci. Au niveau de la flamme, le maximum de fraction massique $Y_{Al_2O_2}$ est plus faible pour le cas sans rayonnement que pour le cas avec rayonnement. Cette différence s'explique par la présence plus importante de l'alumine gazeuse lors de l'activation des réactions produisant l'espèce Al_2O_2 . L'accumulation de l'alumine dans le gaz est la conséquence d'une condensation plus lente de celle-ci pour le cas sans rayonnement. Ensuite le rayonnement influence la composition des gaz brûlés. Pour le cas sans rayonnement, la composition des gaz brûlés atteint un équilibre à 7 mm du front de flamme. Pour le cas avec rayonnement, ce dernier refroidit le gaz ce qui déplace l'équilibre vers la consommation progressive des oxydes d'aluminium jouant le rôle d'intermédiaire de réaction et vers la production d'alumine gazeuse.

Le rayonnement de l'alumine influence peu le profil de température et provoque une diminution de $1,33 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, soit d'environ 5 %, de la vitesse de propagation de la flamme. Le rayonnement déplace l'équilibre vers la consommation progressive des oxydes d'aluminium autres que l'alumine et la production de celle-ci. Il est alors un paramètre important à prendre en compte pour bien évaluer l'état final. Le domaine de calcul étant court (20 mm), la température baisse peu avant d'atteindre la condition limite à la sortie.

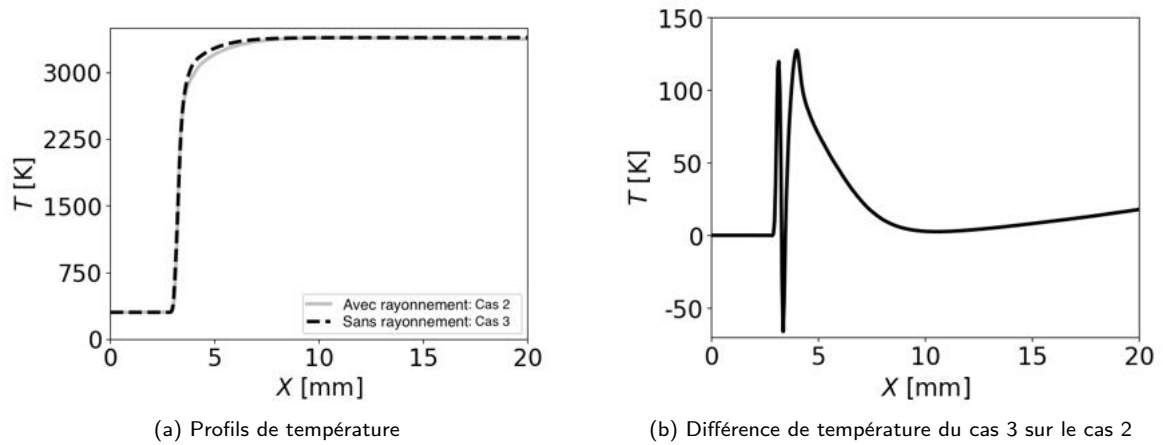


FIGURE 5.12 – Profil de température à travers la flamme pour le cas avec rayonnement (cas 2) et sans rayonnement (cas 3)

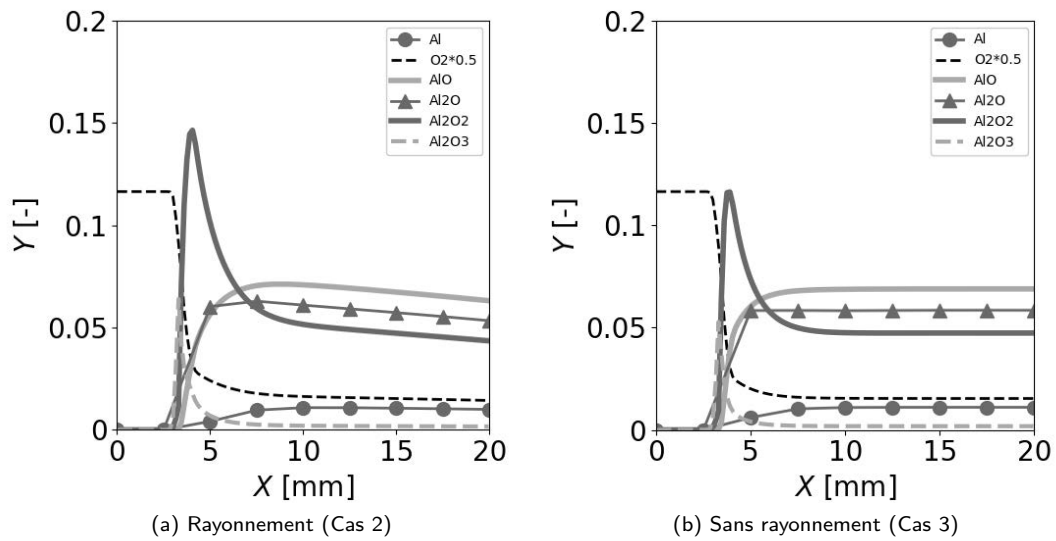


FIGURE 5.13 – Composition du gaz en fraction massique à travers la flamme

5.3 Variation de la richesse : Cas 4 à 7

Les cas 4-7 font varier la richesse Φ du mélange aluminium-air de 0,62 à 2,02. Une analyse est faite sur la vitesse de flamme et la température de flamme en les comparant aux valeurs extraites de la littérature. Pour l'ensemble des cas, la configuration est dérivée du cas 2 avec $R_{germe} = 1$ et le nombre de particules suivies par maille est égal à 5 pour l'aluminium et l'alumine.

5.3.1 Calcul de la richesse

La richesse est calculée en considérant que l'ensemble des particules d'aluminium s'évaporent. Le calcul est similaire à celui fait pour le cas 0D du chapitre 4 où l'Éq. 4.6 était obtenue pour $\Phi=1$. Or pour $\Phi \neq 1$, on obtient l'Éq. 5.1 qui exprime l'évolution de la concentration massique d'aluminium C_{Al} dans l'air en fonction de la richesse selon la température T_i des gaz frais. La Fig. 5.14 trace l'évolution de la concentration d'aluminium dans l'air en fonction de la richesse pour différentes températures.

$$C_{Al} = \frac{Y_{Al,st}}{Y_{O_2,st}} \frac{PY_{O_2,air}}{rT_i} \Phi \quad (5.1)$$

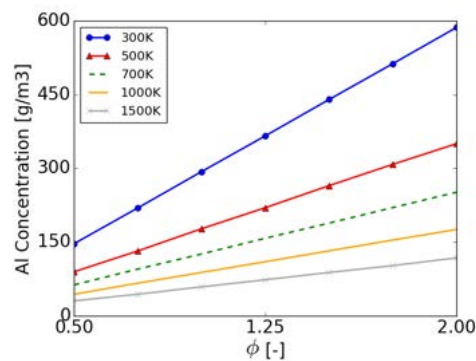


FIGURE 5.14 – Évolution de la concentration en particules d'aluminium dans l'air en fonction de la richesse et selon la température T_i de l'air

5.3.2 Effet sur la vitesse de flamme

Les vitesses de flamme sont mesurées et représentées sur la Fig. 5.15. D'autres mesures de vitesse de flamme extraites de la littérature sont représentées sur cette figure. La vitesse de la flamme 1D aluminium-air simulée augmente avec la richesse. Pour $\Phi=0,62$, la vitesse de flamme est $21,8 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. Mais en augmentant la richesse à $\Phi=2,02$, la vitesse de flamme atteint $36,8 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. Pour $\Phi=1$, la vitesse de flamme est de $27,1 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. L'augmentation de la vitesse de flamme avec la richesse peut s'expliquer du fait de l'augmentation de la surface d'échange de l'aluminium et de la consommation partielle de l'oxygène pour le cas $\Phi=1$. Dans le cas 2, la fraction massique d' O_2 dans les gaz brûlés était de $Y_{O_2}=0,016$. Ainsi en augmentant la richesse de 0,62 à 2,02, la consommation de l'oxygène de l'air par l'aluminium augmente et la flamme accélère.

Les vitesses de flamme obtenues sont proches de certaines expériences avec une flamme aluminium-air. Pour les expériences de propagation de flamme dans une colonne, les résultats obtenus par la simulation sont proches des données expérimentales lorsque la concentration d'aluminium C_{Al} est inférieure à $450 \text{ g}/\text{m}^3$. Les résultats des travaux de L. V. BOICHUK *et al.* [14], et ceux de S. K. ASLANOV *et al.* [4] présentent des vitesses de flamme qui augmentent avec la concentration en aluminium tout comme les simulations. Pour les travaux de P. ESCOT [33], la vitesse de flamme pour une richesse de 2,02 est plus faible que celle mesurée dans ces travaux. Les résultats extraits des expériences de flamme aluminium-air de type « bec Bunsen » sont plus dispersés que ceux des expériences faites avec des flammes de types « colonne ». Cette dispersion peut s'expliquer par le choix de la taille des particules d'aluminium et la difficulté de travailler avec une poudre monodispersée. La diminution de la taille des particules d'aluminium augmente la vitesse de la flamme aluminium-air, mais l'ensemble de ces expériences sont effectuées avec des tailles moyennes de particules proches et comprises dans un intervalle de $5 \mu\text{m}$ à $15 \mu\text{m}$. En réalité, la dispersion des résultats pour les flammes de type « bec Bunsen » est causée principalement par l'utilisation de poudres polydisperses contenant des nano-particules qui accélèrent la flamme. Dans les récents travaux de R. LOMBA [66], la poudre d'aluminium utilisée possède une distribution de taille très centrée sur $7 \mu\text{m}$. La vitesse de flamme mesurée est alors proche de celle que l'on

mesure sur nos simulations 1D. Les expériences de flamme de type « colonne » ont l'avantage d'employer un procédé de sédimentation qui permet de réaliser des études de propagation de flamme avec des distributions de taille de particules plus précises. Ainsi, l'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse suit une tendance plus facilement identifiable que pour les cas de flamme de type « bec Bunsen ». Ces résultats expérimentaux sont proches de nos vitesses de flamme mesurées pour les richesses inférieures à 1,45. Pour une richesse de 2,02, notre vitesse de flamme se situe entre les résultats de Y. L. SHOSHIN [86] et P. ESCOT [33].

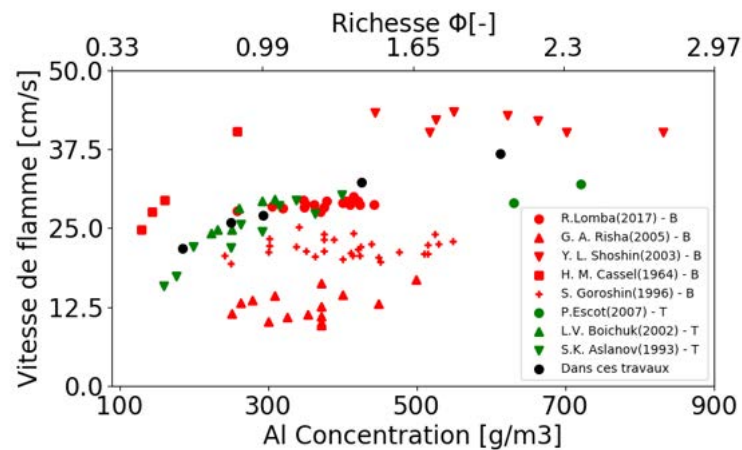


FIGURE 5.15 – Vitesse de la flamme aluminium-air en fonction de la richesse et de la concentration en aluminium pour ces travaux et pour des travaux expérimentaux de la littérature (B : « bec Bunsen », T : « colonne »)

5.3.3 Effet sur la température de flamme

Les températures des flammes 1D obtenues dans les cas 4-7 sont mesurées et représentées sur la Fig. 5.16. Ces résultats sont comparés à la température de flamme en fin de combustion obtenue pour le cas de référence 0D et aux résultats des travaux de R. LOMBA [66]. La température de fin de combustion du cas 0D est supérieure de 97 K à celle de la flamme 1D stœchiométrique. Cette différence de température est due au fait que l'air et les particules d'aluminium sont pré-chauffées à 2000 K contrairement au cas 1D où la flamme est auto-entretenu à 300 K. Ainsi l'énergie thermique utilisée pour le chauffage du gaz et des particules n'est pas prise en compte pour le cas 0D. Pour les résultats expérimentaux des travaux de R. LOMBA [66], les températures de flamme obtenues appartiennent à un intervalle de 360 K autour d'une valeur moyenne de 3146 K. Cette fluctuation est causée par la mesure qui est faite à partir de l'émission spectrale de l' $\text{AlO}_{(g)}$. Cette méthode de mesure peut aussi expliquer que les résultats provenant des cas 4-7 sont supérieurs à ceux des cas expérimentaux de 46 K à 409 K. Pour la mesure de la température de flamme dans les simulations 1D, elle se fait à l'endroit où la température est maximale, soit quelques millimètres derrière le front de flamme. Or les mesures faites dans le cas expérimental ont lieu dans le front de flamme où il y a la présence de l' $\text{AlO}_{(g)}$, mais cette zone est très proche du front de flamme et l'alumine ne s'y est pas encore condensée. La différence de température peut alors s'expliquer par l'absence d'une condensation complète de l'alumine à l'endroit de la mesure de la température et l'existence d'une couche protectrice d'alumine qui oblige à chauffer davantage l'aluminium pour le cas expérimental.

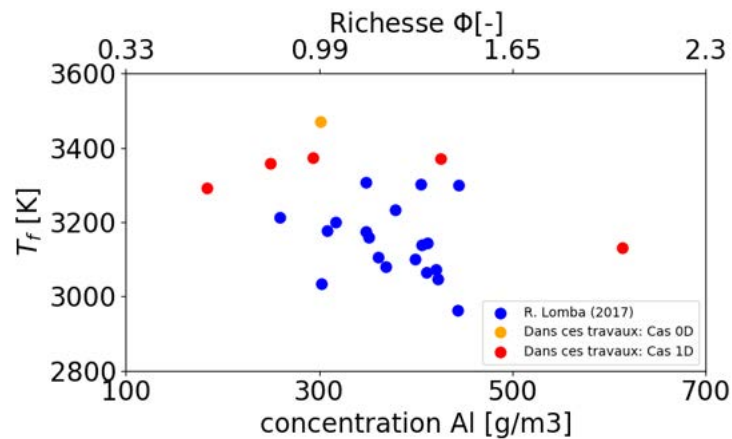


FIGURE 5.16 – Température de la flamme aluminium-air en fonction de la richesse et de la concentration en aluminium pour ces travaux et ceux provenant des travaux de R. LOMBA [66]

5.4 Variation de la taille des particules : Cas 8 à 11

Les cas 8-11 font varier la taille des particules d'aluminium autour de $7\ \mu\text{m}$ tout en restant dans des conditions stœchiométriques. La taille des particules d'aluminium est à $3\ \mu\text{m}$ pour le cas 8 et augmente au fil des cas jusqu'à $15\ \mu\text{m}$ pour le cas 11. Pour chacun des cas, la flamme est stationnaire et sa vitesse et sa température de flamme sont relevées. Une analyse est faite sur les profils de température et sur l'évolution de la taille des particules d'aluminium et d'alumine à travers la flamme. Comme pour la variation de la richesse, l'ensemble des cas sont dérivés du cas 2 avec $R_{germe} = 1$ et le nombre de particules suivies par maille est égal à 5 pour l'aluminium et l'alumine.

5.4.1 Effet sur la vitesse de flamme

La Fig. 5.17 représente l'évolution de la vitesse de flamme en fonction de la taille des particules d'aluminium. La réduction de la taille des particules d'aluminium conduit à une augmentation importante de la vitesse de flamme. Pour des particules d'une taille de $15\ \mu\text{m}$, la vitesse de la flamme est $13,2\ \text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$. La diminution de la taille des particules conduit à une accélération de la flamme qui a une vitesse de $45,1\ \text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$ pour des particules de taille $3\ \mu\text{m}$. Cette évolution est conforme aux observations faites sur le cas 0D. En réduisant la taille des particules et en conservant la même richesse ou concentration d'aluminium, la surface d'échange des particules augmente. L'augmentation de cette surface conduit à l'augmentation de la vitesse d'évaporation des particules d'aluminium. Or la combustion de l'aluminium est limitée par l'évaporation des particules d'aluminium, ce qui conduit à une accélération de la combustion. La combustion des particules d'aluminium devenant plus rapide, la vitesse de la flamme augmente.

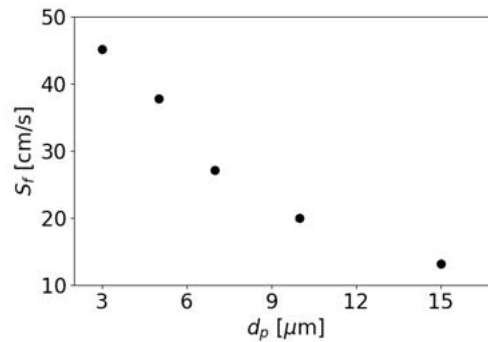


FIGURE 5.17 – Vitesse de la flamme aluminium-air en fonction de la taille initiale des particules d'aluminium

5.4.2 Effet sur la température de flamme

La Fig. 5.18 représente l'évolution de la température des gaz brûlés lors de la variation de la taille des particules d'aluminium. La température tracée dans cette figure est la température maximale atteinte derrière la flamme. Cette température maximale prend en compte la chaleur dégagée par les réactions de combustion et par la condensation de l'alumine. Mise à part la flamme utilisant des particules d'aluminium de taille 3 μm , l'augmentation de la taille des particules influence peu la température de la flamme. Ainsi la température de la flamme diminue lentement de 3393 K à 3332 K lorsque la taille des particules augmente de 5 μm à 15 μm . Cette faible variation s'explique par le fait que la richesse est la même pour tous les cas. La taille des particules impacte la vitesse d'évaporation de celle-ci. Mais une fois la totalité de l'aluminium évaporée, elle réagira avec une quantité d'oxygène très similaire pour l'ensemble des cas.

Pour le cas utilisant des particules de taille 3 μm , la température de flamme est plus faible et atteint 2845 K. Bien que la flamme soit plus rapide que dans les autres cas et que le mélange soit toujours stœchiométrique, un phénomène refroidit le gaz. Ce phénomène est proche de celui qui intervient dans le cas 0D pour la combustion de petites particules dans la section 5.7.2. On a alors un blocage de la chimie pour des raisons inconnues, mais des observations complémentaires sont apportées dans la section suivante.

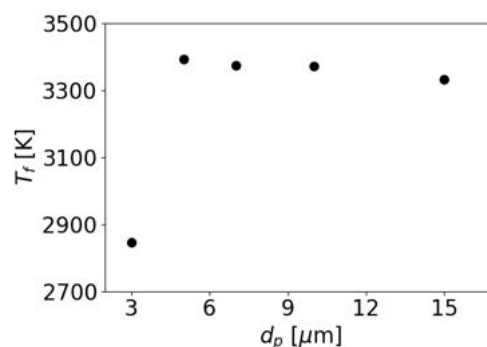


FIGURE 5.18 – Température de la flamme aluminium-air en fonction de la taille initiale des particules d'aluminium

5.4.3 Effet sur la structure de la flamme

À partir des observations faites sur l'évolution de la température de flamme et de la vitesse de flamme en fonction de la taille des particules, une analyse doit être faite sur la structure de la flamme pour ces cas. La Fig. 5.19 superpose l'ensemble des profils de température en fonction de la taille des particules d'aluminium avec un zoom sur la flamme en Fig. 5.19 (b). Cette superposition met en avant l'influence de la taille des particules d'aluminium sur l'épaisseur de la flamme. La réduction du diamètre des particules d'aluminium conduit à une augmentation du gradient de température et donc à la diminution de l'épaisseur de la flamme. Pour les cas pour lesquels la taille des particules est comprise entre $7\ \mu\text{m}$ et $15\ \mu\text{m}$, les profils de température ont une forme similaire. Néanmoins, la diminution de la taille des particules d'aluminium entraîne une augmentation des vitesses d'évaporation de l'aluminium et de condensation de l'alumine ce qui conduit à une augmentation du gradient de température. Pour le cas utilisant des particules de $5\ \mu\text{m}$, le profil commence à changer par rapport aux cas précédents. Une rupture de pente a lieu et est suivie d'une augmentation de la température plus rapide que dans les autres cas qui conduit à une valeur finale de la température proche de celle des autres cas. Mais pour le cas utilisant des particules à $3\ \mu\text{m}$, le profil de température est différent. La température augmente rapidement jusqu'à $2845\ \text{K}$ et diminue ensuite pour tendre vers $2370\ \text{K}$. Or cette température correspond à celle de la fusion de l'alumine.

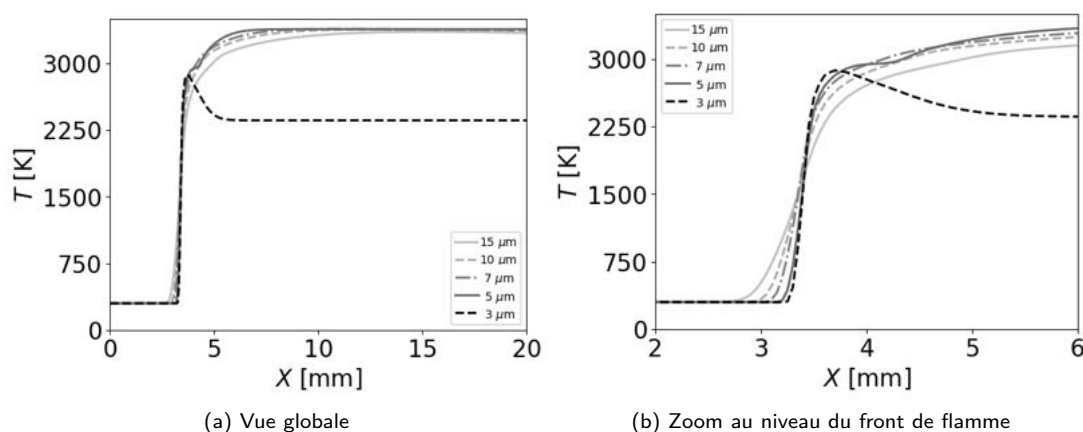


FIGURE 5.19 – Profils de température de la phase gazeuse selon la taille des particules d'aluminium

Les Figs. 5.20 (a), (b) et (c) illustrent l'évolution de la taille des particules d'aluminium et des germes d'alumine à travers la flamme pour différentes tailles initiales de particules d'aluminium. L'augmentation de la taille initiale des particules d'aluminium conduit à une vitesse d'évaporation plus lente. Ainsi les particules finissent de s'évaporer plus loin derrière le front de flamme. Dans le cas où les particules d'aluminium ont un diamètre initial de $5\ \mu\text{m}$, ces dernières finissent de s'évaporer $0,81\ \text{mm}$ derrière le front de flamme. Mais pour les cas utilisant des particules de $10\ \mu\text{m}$ et $15\ \mu\text{m}$, la fin de l'évaporation a lieu respectivement $1,9\ \text{mm}$ et $3,0\ \text{mm}$ derrière le front de flamme. Cette réduction de la vitesse d'évaporation conduit à l'épaississement de la flamme. L'épaisseur de la flamme peut être définie de deux façons. Premièrement l'épaisseur thermique de la flamme diphasique peut être définie comme la distance entre le point où a lieu la montée en température des gaz frais et le lieu où la température atteint son maximum. Cette épaisseur prend en compte les réactions de combustion et la condensation de l'alumine. L'épaisseur de flamme peut également être définie comme la zone où les réactions chimiques de combustion ont lieu. Cette épaisseur particulière de la flamme est la distance entre le début de montée de la température et l'évaporation complète de l'aluminium liquide. Quelle que soit la définition choisie, l'épaisseur de la flamme augmente avec la taille des particules. La vitesse de condensation de l'alumine est aussi influencée d'après ce qui peut être observé sur les cas 9, 10 et 11. Du fait d'une production plus lente de l'alumine gazeuse et de la réduction de la surface des germes d'alumine, l'alumine gazeuse se condense plus lentement dans la flamme lorsque la taille des particules d'aluminium augmente. Le dégagement de chaleur lié à la condensation de l'alumine est réparti sur une plus grande longueur dans la flamme pour les grosses particules d'aluminium. Pour les petites particules, la surface d'échange de l'alumine solide étant

plus grande et la condensation de l'alumine étant plus rapide, les particules d'alumine grossissent à la même vitesse dans le front de flamme que le cas 3 mais cette croissance se fait dans un plus court délai comme cela peut-être observé pour le cas avec des particules de 5 μm par rapport aux autres cas. Cette croissance rapide provoque une rupture de pente sur le profil de température pour ce cas et une chute importante de température pour le cas utilisant des particules de 3 μm .

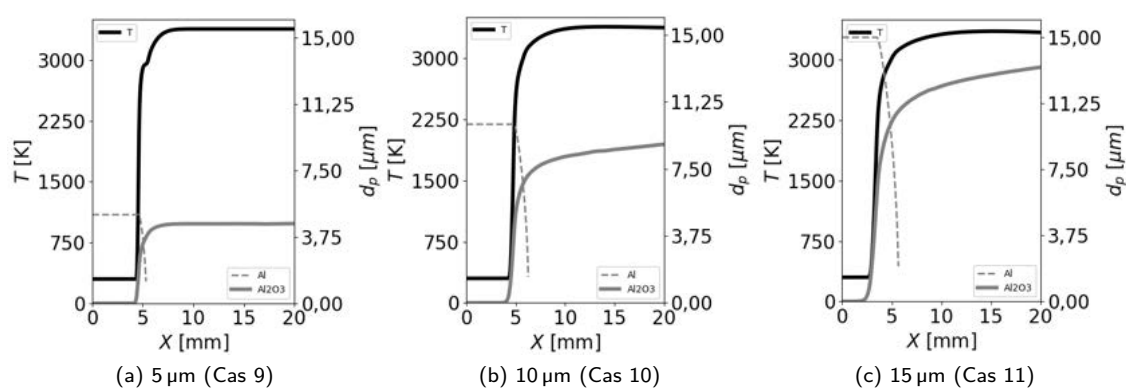


FIGURE 5.20 – Profils de température du gaz et de la taille des particules d'aluminium et des germes d'alumine à travers la flamme

La Fig. 5.21 représente le profil de température de la phase gazeuse et l'évolution de la température des particules d'une taille de 3 μm à travers la flamme. Cette représentation met en avant le problème lié aux phénomènes de fusion de l'alumine et du blocage de la chimie pour le cas où la condensation, suivie de la solidification, est trop rapide. Ce phénomène avait été constaté pour les cas 0D. Avec la réduction de la taille des particules d'aluminium, le choix de $R_{germe} = 1$ conduit à la présence d'un grand nombre de germes d'alumine et à une vitesse de condensation importante. Lors de leur arrivée au niveau du front de flamme, les germes d'alumine vont grossir rapidement en permettant la condensation et la solidification de l'alumine gazeuse produite par les réactions de combustion. Or la production d'alumine est grande à cause de l'évaporation rapide de l'aluminium. Lorsque l'alumine atteint sa température de fusion, elle accumule la chaleur nécessaire pour fondre. Mais cette quantité de chaleur est trop importante pour être atteinte, ce qui conduit à un refroidissement des gaz brûlés jusqu'à la température de l'alumine toujours en phase de fusion. Cet effet endothermique est constaté sur les flammes utilisant des particules de taille inférieure à 5 μm .

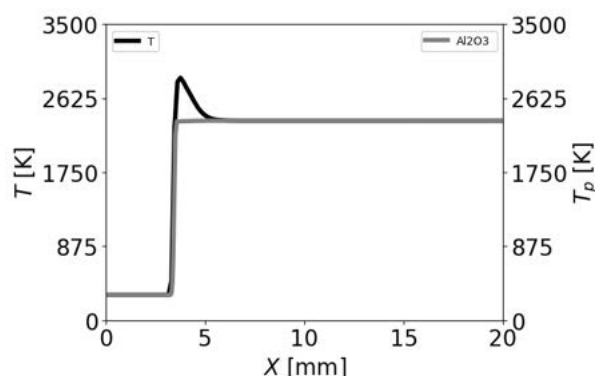


FIGURE 5.21 – Profil de température de la phase gazeuse et évolution de la température des particules d'aluminium et d'alumine pour un diamètre initial des particules d'aluminium de 3 μm

À partir de l'analyse faite sur l'influence de la taille des particules d'aluminium avec $R_{germe} = 1$, 3 régimes de combustion peuvent être établis. Pour des petites particules d'aluminium de taille inférieure à $3 \mu\text{m}$, un blocage causé par la fusion de l'alumine solide a lieu. Les vitesses d'évaporation de l'aluminium et de condensation de l'alumine sont grandes à cause de la grande surface d'échange des particules. Les germes d'alumine grossissent rapidement et l'énergie dégagée par les réactions de combustion n'est pas suffisante pour permettre la fusion complète de l'alumine dans la flamme. Toute la chaleur dégagée par les réactions est alors absorbée par les particules d'alumine, et le milieu refroidit puis reste bloqué à la température de fusion de l'alumine. Pour des grosses particules d'aluminium de taille supérieure à $7 \mu\text{m}$, l'évaporation de l'aluminium et la condensation de l'alumine sont lentes, ce qui conduit à une lente croissance des germes d'alumine. Lorsque la particule d'alumine atteint sa température de fusion, la masse à fondre est petite et la chaleur dégagée par les réaction de combustion est largement suffisante pour faire évaporer les particules d'aluminium et faire fondre l'alumine. Le profil de température est alors monotone, croissant et sans point de rebroussement. Enfin, pour des particules d'aluminium de taille intermédiaire, autour de $5 \mu\text{m}$, l'évaporation et la condensation sont assez rapides, pour faire grossir les germes d'alumine, mais pas suffisamment pour lui permettre de changer de phase. La chaleur nécessaire à la fusion est absorbée très vite, d'où l'existence d'un point de rebroussement sur le profil de température.

5.5 Variation de la température des gaz frais : Cas 12 à 17

Les cas 14 et 17 font varier la température initiale des particules et de l'air. La taille des particules utilisées est de $7 \mu\text{m}$ et la concentration des particules dans le gaz est calculée pour que le mélange soit stœchiométrique à la température initiale, T_i , considérée. La valeur de la concentration est celle obtenue par l'Éq. 5.1. Ainsi la concentration de l'aluminium diminue avec la température. À partir des cas 14 et 17, d'autres flammes sont réalisées en diminuant la richesse à $\Phi=0,85$ (cas 12 et 15) et $\Phi=0,62$ (cas 13 et 16). Les cas d'étude 12-14 et 15-17 nous permettent d'étudier l'effet de l'augmentation de T_i sur la vitesse et la température de la flamme. Pour l'ensemble des cas, la configuration est dérivée du cas 2 avec $R_{germe} = 1$ et le nombre de particules suivies par maille est égale à 5 pour l'aluminium et l'alumine. Contrairement au cas 2, le rayonnement de l'alumine est retiré pour que le mélange puisse atteindre l'équilibre dans le domaine de calcul et pour obtenir une température des gaz brûlés constante derrière la flamme.

5.5.1 Influence sur la vitesse de flamme

La Fig. 5.22 représente l'évolution de la vitesse de flamme pour une richesse allant de 0,62 à 1,00 et pour une température initiale T_i égale à 300 K, 700 K et 1000 K. Pour une température initiale T_i fixée, l'augmentation de la richesse provoque une augmentation de la vitesse de la flamme. À richesse fixée, la vitesse de la flamme augmente fortement avec la température T_i . À la stœchiométrie, la vitesse de la flamme est de $27,1 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ pour $T_i = 300 \text{ K}$, $75,4 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ pour $T_i = 700 \text{ K}$ et $115,5 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ pour $T_i = 1000 \text{ K}$.

Cette accélération est essentiellement due à deux éléments. Le premier est le pré-chauffage des particules d'aluminium qui permet de diminuer leur durée d'évaporation, voire d'injecter des particules déjà sous forme liquide pour $T_i = 1000 \text{ K}$. Par ailleurs, l'énergie non utilisée pour chauffer les particules chaleur peut être convertie en énergie cinétique des gaz brûlés. Le second élément est l'accélération de la cinétique chimique avec l'augmentation de T_i . La vitesse des réactions chimiques est pilotée par la loi d'Arrhenius, ce qui conduit à une accélération des réactions lorsque la température augmente.

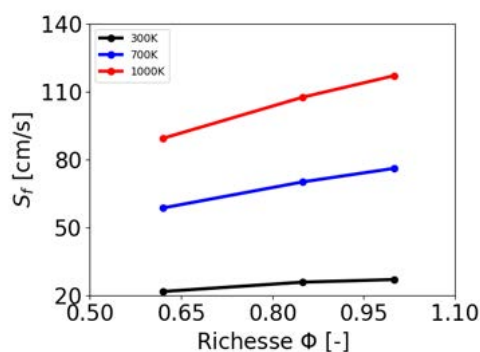


FIGURE 5.22 – Vitesse de flamme en fonction de la richesse Φ pour plusieurs températures initiales T_i des particules et de l'air

5.5.2 Influence sur la température de flamme

La Fig. 5.23 représente l'évolution de la température des gaz brûlés pour une richesse allant de 0,62 à 1,00 et pour une température initiale T_i de 300 K, 700 K et 1000 K. Pour une température T_i fixée, la température de la flamme augmente avec la richesse Φ . L'origine de cette évolution est la même que celle décrite lors de l'étude de l'influence de la richesse sur la flamme 1D (voir Section 5.3). Mais pour une richesse constante, l'augmentation de la température T_i provoque une baisse de la température de flamme de quelques dizaines de kelvins. L'origine de cette baisse de température est la variation de l'énergie du mélange. En effet, quand T_i augmente, pour une richesse donnée, il faut injecter moins de matière dans le domaine. L'énergie pouvant être dégagée par unité de volume grâce aux réactions chimiques est donc moins grande. Par ailleurs, comme elle sera constatée dans la section suivante, l'augmentation de la température T_i diminue la quantité d'alumine liquide formée, ce qui entraîne une diminution de la chaleur dégagée par condensation. Sur le graphique, on constate également que la courbe à $T_i = 300\text{K}$ a une température des gaz brûlés inférieure aux autres courbes de T_i pour $\Phi=0,64$ et les dépasse à $\Phi=1,0$. Malheureusement aucune explication ne peut être apportée à ce comportement.

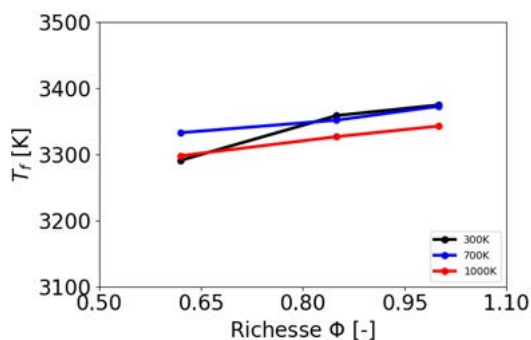


FIGURE 5.23 – Température de flamme en fonction de la richesse Φ selon la température initiale T_i des particules et de l'air

5.5.3 Influence sur la composition des phases

Les Figs. 5.24 (a), (b) et (c) représentent l'évolution des fractions molaires d'aluminium, soit $n_i/n_{Al,tot}$, sous ses différentes formes à travers la flamme pour 3 températures T_i différentes tels que l'aluminium présent dans les espèces gazeuses X_g , dans l'aluminium liquide (et solide) $X_{Al(l,s)}$, dans l'alumine liquide (et solide) $X_{Al_2O_3(l)}$ et dans l'ensemble des phases $X_{Al,tot}$. Dans les gaz frais, la proportion d'aluminium condensée, $X_{Al(l,s)}$ est de 1 pour les 3 cas car l'aluminium est uniquement en phase condensée. Dans la flamme, l'aluminium en phase condensée disparaît totalement pour être consommé par la combustion et produire des oxydes d'aluminium. Les proportions X_g et $X_{Al_2O_3(l)}$ augmentent rapidement au niveau du front de flamme avec une pente très similaire. Mais la proportion d'aluminium se trouvant sous forme gazeuse diminue après l'évaporation totale de la l'aluminium contrairement à $X_{Al_2O_3(l)}$. Pour les 3 cas, le maximum de la fraction molaire X_g est à une valeur proche de 0,33. Cette similitude sur les allures des courbes au niveau du front de flamme peut s'expliquer du fait que les cas sont réalisés à la stœchiométrie et à $R_{germe} = 1$. De même, pour les 3 cas, la proportion $X_{Al,tot}$ de l'aluminium présent dans l'ensemble des espèces des phases dispersée et gazeuse est constante à travers la flamme. Cette invariance valide le fait qu'il n'y a pas de problème numérique sur la conservation de masse du système pendant les changements de phase. Les différences entre les 3 cas apparaissent uniquement derrière la flamme, après l'évaporation de la totalité de l'aluminium. Pour $T_i = 300$ K, la proportion d'aluminium se trouvant au sein des espèces gazeuses est de 0,11 et la proportion d'aluminium se trouvant sous forme d'alumine condensée est de 0,89. Pour $T_i = 700$ K, la proportion d'aluminium se trouvant dans les espèces gazeuses est de 0,21 et la proportion d'aluminium se trouvant sous forme d'alumine condensée est de 0,79. Pour $T_i = 1000$ K, la fraction molaire d'aluminium des espèces gazeuses est de 0,26 et la fraction d'aluminium dans l'alumine liquide est de 0,74. Ainsi l'augmentation de la température initiale T_i des gaz frais conduit à une diminution de la production d'alumine liquide. À l'équilibre, lorsque la température augmente, une plus grande quantité d'aluminium se trouve répartie au sein des espèces de la phase gazeuse.

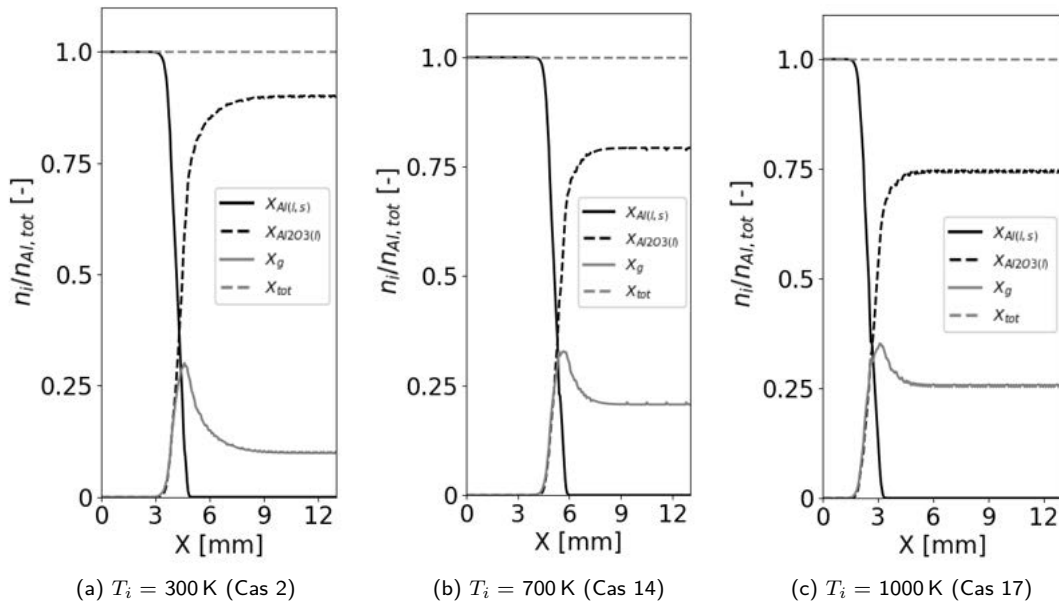


FIGURE 5.24 – Profils de répartition de l'aluminium au sein des phases, exprimée en fraction de la quantité de matière totale en aluminium, pour différentes températures initiales T_i

5.6 Variation du nombre de germes d'alumine : Cas 18 à 50

L'ensemble des cas précédents utilisait un rapport $R_{germe} = 1$ et un nombre de particules suivies d'alumine $N_{s,g}$ égal à 5 particules par maille dans les gaz frais. La valeur choisie pour le premier paramètre se justifiait par le raisonnement physique qu'une particule d'aluminium produit un lobe d'alumine lors de sa combustion qui grossit ensuite au cours du temps par condensation. Mais des problèmes numériques ont été rencontrés pour des cas particuliers où un grand nombre de germes d'alumine était injecté. Ces problèmes numériques ont déjà été abordés dans la section 4.4.2. Pour le second paramètre, le fait d'avoir 5 particules d'aluminium dans les gaz frais est un bon compromis pour le temps de calcul et la résolution. Les particules d'aluminium s'évaporent rapidement dans la flamme, ce qui leur permet de ne pas subir l'accélération liée au passage de la flamme. L'accélération de la phase gazeuse à travers la flamme conduit à une réduction du nombre de particules suivies par maille dans les gaz brûlés. Contrairement à l'aluminium, l'alumine ne s'évapore pas et le nombre de particules correspondantes par maille est fortement réduit. Par exemple pour le cas 2, le nombre de particules d'alumine suivies se réduit de 5 particules par maille dans les gaz frais à une particule suivie toutes les deux mailles dans les gaz brûlés.

Ces deux paramètres peuvent avoir une influence sur la flamme aluminium-air. Les cas 18-20 font varier le nombre de germes suivis d'alumine $N_{s,g}$ par maille dans les gaz frais de 10 à 50. Les cas 21-50 font varier la taille des particules d'aluminium de $3\ \mu\text{m}$ à $15\ \mu\text{m}$ et le rapport R_{germe} de 0,1 à 10, ce qui correspond à un nombre de germes d'alumine plus grand que le nombre de particules d'aluminium pour $R_{germe} > 1$ et à l'inverse pour $R_{germe} < 1$. Pour les autres paramètres, ces cas sont identiques aux cas 2 et 8-11 et concernent une flamme stationnaire et stœchiométrique utilisant des particules de taille micrométrique et de température initiale T_i 300 K.

5.6.1 Effet du nombre de particules d'alumine suivies

L'influence du nombre de particules d'alumine suivies par maille dans les gaz frais est illustrée sur les Figs. 5.25 (a) et (b). Elles représentent l'évolution du profil de température et du taux de dégagement de chaleur au niveau de la flamme 1D aluminium-air pour différentes valeurs du nombre $N_{s,g}$. Ainsi les cas 2 et 18-20 utilisent un nombre $N_{s,g}$ égal à 5, 10, 25 et 50 particules suivies par maille dans les gaz frais. La superposition des profils de température de la phase gazeuse indique une très faible influence du nombre $N_{s,g}$. Néanmoins l'augmentation de ce paramètre conduit à un lissage du profil du taux de dégagement de chaleur au niveau la flamme. Elle est due à une meilleure répartition de l'alumine liquide dans le maillage lors de l'accélération des gaz brûlés. Pour le cas $N_{s,g} = 50$ (Cas 20) dans les gaz frais, le nombre de particules d'alumine suivies dans les gaz brûlés est d'environ 4 par maille. Ainsi la chaleur transférée au gaz lors de la condensation de l'alumine a une répartition plus homogène que dans le cas où $N_{s,g} = 5$ ou 10 (respectivement les Cas 2 ou 18). Pour la température de flamme et la vitesse de flamme, le nombre $N_{s,g}$ n'a aucune influence.

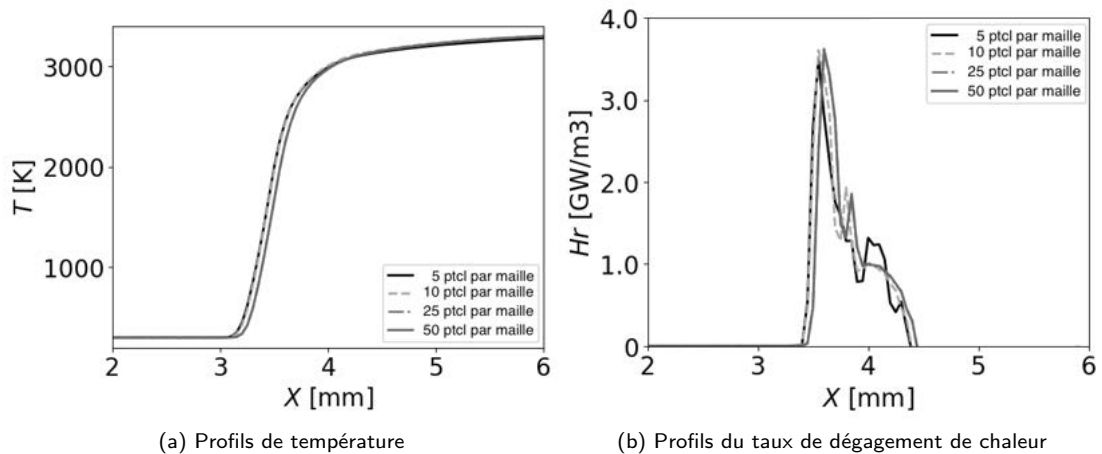


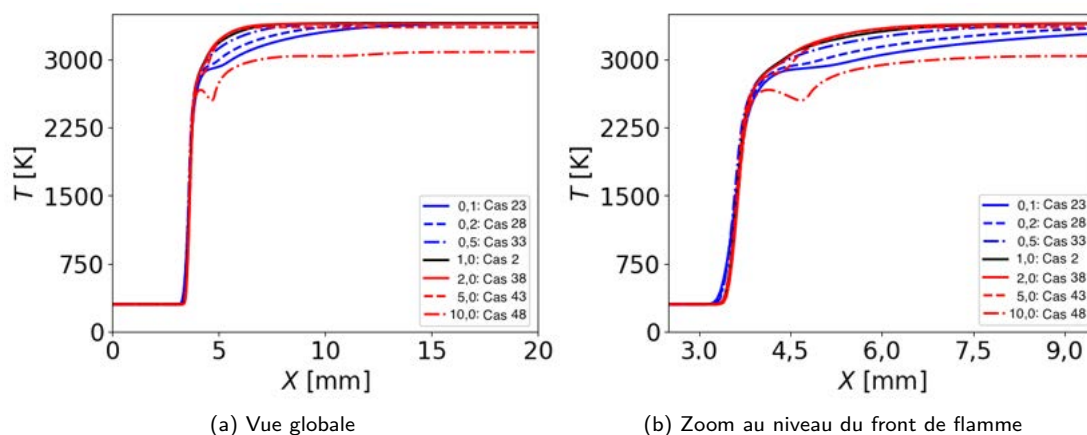
FIGURE 5.25 – Évolution des profils de température et du taux de dégagement de chaleur au niveau de la flamme en fonction du nombre de particules suivies d'alumine par maille

5.6.2 Effet du rapport R_{germe}

Notre modèle de combustion n'employant pas de sous-modèle de nucléation, la méthode de germination de l'alumine est un élément important et l'influence des paramètres doit être étudiée. Les cas 23, 28, 33, 38, 43 et 48 font varier le rapport R_{germe} de 0,1 à 10, ce qui correspond à un nombre de germes d'alumine plus grand que le nombre de particules d'aluminium pour $R_{germe} > 1$ et à l'inverse pour $R_{germe} < 1$. Des flammes 1D sont obtenues et leurs profils de température sont tracés pour évaluer l'influence du rapport R_{germe} . Pour vérifier l'influence de ce paramètre en fonction de la taille des particules d'aluminium, des cas supplémentaires, au nombre de 24, ont été réalisés. Ces cas sont similaires aux cas 23, 28, 33, 38, 43 et 48 mais en modifiant la taille des particules d'aluminium, tout en restant dans des conditions stœchiométriques. Ces études permettent d'analyser l'influence du rapport R_{germe} sur la flamme aluminium-air pour différentes tailles des particules d'aluminium.

5.6.2.1 Profil de température de la flamme

L'influence de la variation du rapport R_{germe} sur le profil de température de la flamme aluminium-air est représenté sur la Fig. 5.26. Pour $R_{germe} < 1$, la température finale atteinte dans les gaz brûlés est la même pour l'ensemble des cas. La différence entre ces profils est une montée plus progressive de la température derrière le front de flamme, lorsque R_{germe} diminue. Cette augmentation progressive avait été constatée sur les profils de température de flamme 1D lors de l'augmentation de la taille des particules d'aluminium (Cas 8-11). Ainsi les conclusions de l'analyse qui avait été faite sur la réduction du nombre de germes d'alumine est encore constatée pour les cas présents. Après l'évaporation et la combustion de l'aluminium, l'alumine gazeuse se condense et relache de la chaleur vers le gaz. Or la réduction du rapport R_{germe} diminue la surface d'échange de l'alumine, ce qui réduit la vitesse de condensation. Cette dernière prend donc plus de temps et se termine plus en aval du front de flamme. Pour $1 \leq R_{germe} \leq 5$, le rapport R_{germe} a une faible influence sur le profil de température. Néanmoins une rupture de pente commence à apparaître sur le profil de température pour $R_{germe} = 5$ et s'accroît avec l'augmentation de R_{germe} à 10. Ce phénomène avait été observé dans le cas de flamme 1D utilisant des particules d'aluminium de taille 3 μm . Le fait de retrouver ce phénomène dans des cas avec un grand nombre de germes d'alumine accompagnés de particules d'aluminium à 7 μm confirme que la cause est effectivement liée à la méthode de germination et à un blocage de la chimie.

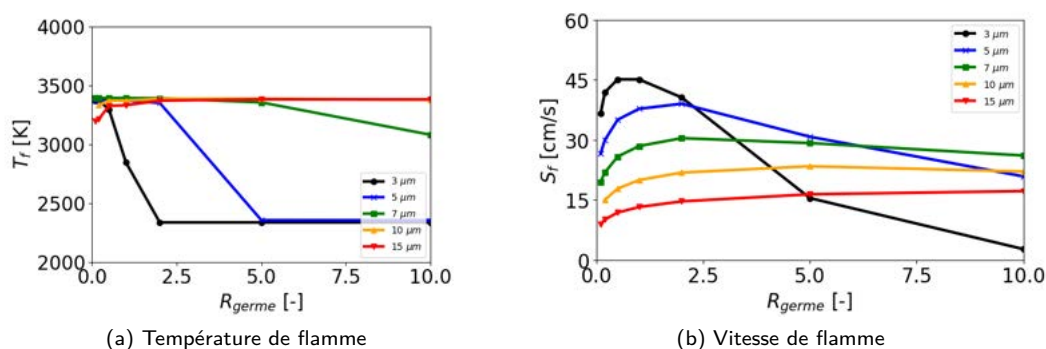
FIGURE 5.26 – Évolution du profil de température de la flamme aluminium-air en fonction du rapport R_{germe}

5.6.2.2 Température et vitesse de flamme

Dans la section 5.6.2.1, l'influence du rapport R_{germe} sur la température et la vitesse de flamme a été étudiée pour des particules d'aluminium d'une taille de $7\ \mu\text{m}$ injectées en proportion stœchiométrique. Les Figs. 5.27 (a) et (b) représentent l'évolution de la température et de la vitesse de flamme en fonction de R_{germe} pour différentes tailles de particules d'aluminium allant de $3\ \mu\text{m}$ à $15\ \mu\text{m}$. Pour l'ensemble des cas de température ou de vitesse de flamme, l'allure des courbes est similaire et se compose d'une phase de croissance, puis d'une phase de décroissance. Pour la température de flamme, elle augmente de moins en moins rapidement avec d_p pour des petits rapports R_{germe} et diminue de plus en plus rapidement avec d_p pour des grands rapports R_{germe} . Pour la vitesse de flamme, la pente de la courbe diminue de plus en plus lentement avec l'augmentation de la taille des particules d'aluminium lorsque R_{germe} augmente.

Pour $R_{germe} \leq 1$ et $d_p \leq 15\ \mu\text{m}$, la diminution du rapport R_{germe} a une plus forte influence sur la réduction de la vitesse de flamme que sur celle de la température. Pour la température de flamme, elle varie très peu avec R_{germe} sauf pour les grandes tailles de particules. Cette évolution est la conséquence de la réduction grandissante du nombre de germes d'alumine injectés avec l'aluminium. La diminution de la surface d'échange ralentit la condensation et empêche l'alumine gazeuse de se condenser aussi vite qu'elle est produite. Le dégagement de chaleur est alors moins important dans le front de flamme, ce qui conduit à une diminution de la température de flamme. Pour la vitesse de flamme, elle est d'autant plus faible que la taille des particules est grande et que R_{germe} est faible. La vitesse de flamme augmente lorsque la taille des particules diminue du fait de l'augmentation de la vitesse d'évaporation de l'aluminium induite par l'augmentation de la surface d'échange. Mais la vitesse d'évaporation est aussi dépendante de la température du gaz. Lorsque R_{germe} diminue, la vitesse de condensation de l'alumine diminue. Le chauffage provenant du changement de phase de l'alumine est moins important dans le front de flamme, ce qui réduit la température du gaz et la vitesse d'évaporation de l'aluminium. Donc on constate une réduction de la vitesse de flamme.

Pour $R_{germe} > 1$ et $d_p \geq 7\ \mu\text{m}$, la température et la vitesse de flamme sont peu influencées par le rapport R_{germe} , sauf pour $d_p = 7\ \mu\text{m}$ et $R_{germe} = 10$ où a lieu une diminution de la température. Cette diminution s'accroît avec la réduction de la taille des particules $d_p \leq 5\ \mu\text{m}$ jusqu'à atteindre la température de fusion de l'alumine et s'accompagne d'une grande diminution de la vitesse de flamme. Ces éléments illustrent une nouvelle fois les conséquences liées à la méthode de germination de l'alumine et du blocage de la chimie qui intervient pour un grand nombre de germes injectés.

FIGURE 5.27 – Évolution de la flamme selon le rapport R_{germe} et la taille des particules d'aluminium

5.7 Conclusion sur la flamme 1D aluminium-air

La modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium avec l'air nous a permis de réaliser des simulations de flammes 1D avec AVBP. La flamme d'aluminium, complexe à initier dans le domaine expérimental, comme le montrent les travaux de R. LOMBA [66], s'est avérée également complexe à initier dans le domaine numérique. Une démarche d'allumage de la flamme a été mise en place.

Les flammes obtenues sont très satisfaisantes par leur structure et leurs caractéristiques. Leur structure est proche de ce qu'on observe dans les flammes de type « colonne » ou « bec Bunsen ». À l'approche de la flamme, les particules d'aluminium chauffent et changent de phase pour devenir des gouttes d'aluminium. Dans cet état, elles s'évaporent et fournissent à la flamme le combustible nécessaire pour l'entretenir. L'alumine gazeuse, présente dans les produits de combustion, se condense pour former des gouttes d'alumine derrière la flamme dont la taille peut atteindre celle des particules d'aluminium. Cette condensation s'accompagne d'une libération de chaleur. L'ensemble de ces événements sont présents dans nos simulations 1D grâce à l'utilisation de plusieurs modèles. Premièrement, comme il a été montré dans le chapitre 4, elles emploient un modèle d'évaporation de l'aluminium qui donne des temps caractéristiques proches de ceux de la littérature. Deuxièmement, elles emploient un schéma réactionnel pour la combustion de l'aluminium avec l'air extraite de la littérature. Dernièrement, elles emploient des germes d'alumine initialement présents avec les particules d'aluminium permettant la condensation de sa phase gazeuse.

La variation des paramètres comme la taille des particules, la richesse et la température des gaz frais a montré une cohérence avec les cas expérimentaux de la littérature. L'augmentation de la taille des particules à richesse constante diminue la surface d'échange des particules d'aluminium, ce qui diminue la vitesse d'évaporation des particules dans le front de flamme. Le débit du combustible étant limité par la vitesse d'évaporation, la flamme ralentit lorsque la taille des particules d'aluminium augmente. De même, la diminution de la richesse pour une taille de particules d'aluminium fixée conduit à la diminution de la vitesse de flamme. Concernant la température de flamme, cette grandeur est peu influencée par la taille des particules ou la richesse lorsque ces paramètres sont respectivement supérieur à 5 μm et inférieur à 1,45. La température de flamme garde ainsi une valeur proche de 3375 K. Au contraire, la vitesse de flamme passe de 13,2 $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$ à 45,12 $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$ selon les cas. La variation de la température initiale du gaz et des particules a une forte influence sur la vitesse de flamme. Avec l'augmentation de la température T_i de 700 K, la vitesse de flamme accélère pour atteindre une valeur de 115,5 $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$ alors que la température varie peu. Cette accélération s'explique par la cinétique qui devient plus rapide avec l'augmentation de la température initiale. Mais elle s'explique aussi par le pré-chauffage des particules d'aluminium qui diminue leur durée d'évaporation dans la flamme et l'énergie utilisé pour chauffer les particules. Ainsi l'augmentation de la température initiale des gaz frais et des particules induit une accélération de la flamme et modifie l'équilibre des gaz brûlés en le déplaçant vers une production plus faible d'alumine liquide.

La modélisation de la flamme aluminium-air se base sur l'injection de germes d'alumine avec l'aluminium solide pour permettre la condensation de l'alumine gazeuse. Il a été vu que dans les expériences, une particule d'aluminium qui brûle produit de l'alumine gazeuse qui se condense sous forme d'un lobe à la surface de l'aluminium. Ainsi le choix d'un rapport $R_{germe} = 1$ a été fait pour l'ensemble des cas ce qui suit l'idée qu'une particule d'aluminium produit une particule d'alumine en fin de combustion. Mais le choix de $R_{germe} = 1$ conduit à un nombre trop grand de germes d'alumine injectés pour les cas où la taille des particules d'aluminium diminue à richesse constante. On a alors une augmentation de la vitesse de condensation dans le front de flamme, ce qui provoque un blocage dans la chimie, une diminution de la température et de la vitesse de flamme. Cette conséquence s'estompe lorsque R_{germe} diminue. Pour le cas des grosses particules d'aluminium, seule une forte diminution de R_{germe} peut impacter les caractéristiques de la flamme en diminuant fortement la vitesse de condensation.

En résumé, l'emploi de ce modèle de combustion diphasique fournit des résultats satisfaisants si on se limite à des particules d'aluminium de taille supérieure à $5 \mu\text{m}$ et de richesse inférieure à 1,45 avec $R_{germe} = 1$. Pour des particules plus petites ou à une richesse plus grande, une modification du rapport R_{germe} devra être faite pour permettre à l'alumine de passer son état transitoire de fusion et éviter des effets endothermiques trop importants sur la phase gazeuse. Le cas numérique qui sera réalisé dans le chapitre 6 utilisera les observations faites sur les flammes 1D aluminium-air stœchiométrique à la température de 300 K et avec des particules d'aluminium de taille $7 \mu\text{m}$. Ces flammes ont montré qu'elles étaient suffisamment résolues lorsque le maillage a une résolution de $50 \mu\text{m}$ et lorsque 5 particules sont suivies par maille.

Chapitre 6

Étude numérique 2D de flammes aluminium-air

L'analyse faite sur les flammes 1D aluminium-air dans le chapitre précédent a permis la validation de l'ensemble des modèles. Ce chapitre présente la simulation d'une flamme 2D en utilisant comme référence la flamme expérimentale des travaux de R. LOMBA [66]. Cette flamme expérimentale est présentée en détails dans la section 6.1 en développant sa mise en place et ses caractéristiques. À partir de cette expérience, la flamme numérique est mise en place en définissant un domaine de calcul et une démarche d'initialisation de la flamme. La section 6.2 présente ces éléments. Ainsi une flamme stœchiométrique 2D stabilisée est obtenue et analysée dans la section 6.3. Un développement sera fait sur la structure de la flamme et sur l'évolution de la phase dispersée à travers celle-ci. Cette analyse est comparée avec les observations faites dans les travaux de R. LOMBA. Des conclusions sur la modélisation de la combustion diphasique de l'aluminium avec l'air pourront être faites et des points à améliorer seront mis en avant dans la section 6.5.

6.1 Présentation de la flamme aluminium-air de référence

Cette section a pour objectif d'apporter des précisions sur les travaux de R. LOMBA [66] réalisés au sein du CNRS-ICARE à Orléans. Comme il a été précisé en début du chapitre 1, ses travaux portaient sur l'analyse de la combustion diphasique de l'aluminium à partir d'un brûleur de type « bec Bunsen ». Les cas expérimentaux exploités dans sa thèse servent de cas de référence dans ces travaux pour établir des simulations 2D de flamme aluminium-air. Ainsi le dispositif expérimental et les résultats de son études sont présentés.

6.1.1 Dispositif expérimental

6.1.1.1 Description globale

Le dispositif expérimental se présente comme sur la Fig.6.1. Il est alimenté par des arrivées d'air, d'azote et de méthane couplées avec un générateur de particules d'aluminium pour créer des flammes aluminium-air et des flammes hybrides avec un mélange aluminium-air-méthane. Pour la mesure des propriétés de la flamme, un système de capteurs et de caméras est mis en place. Pour finir, la buse du brûleur, qui est en laiton, est refroidie avec de l'eau et les produits de combustion sont collectés dans un circuit d'échappement.

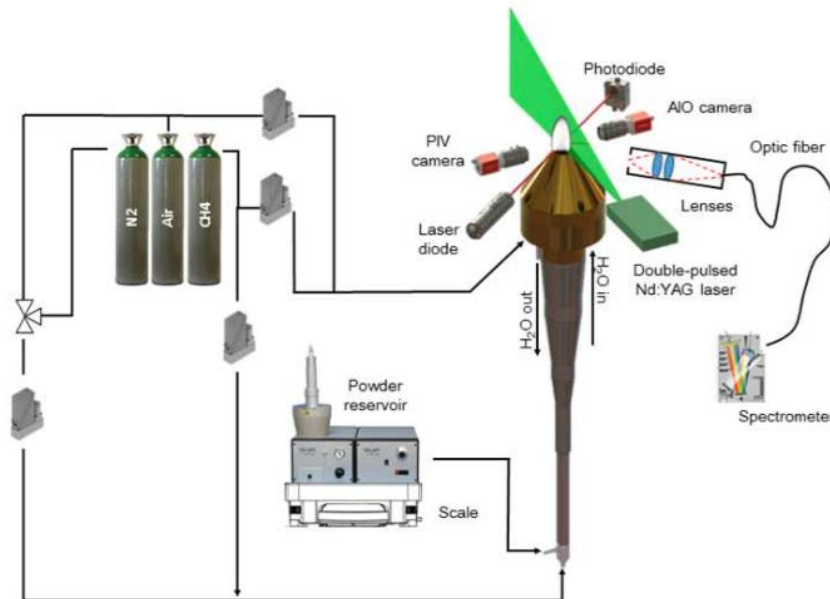


FIGURE 6.1 – Schéma du dispositif expérimental (image extraite de [66])

6.1.1.2 Sortie du brûleur

La sortie du brûleur est illustrée en Fig. 6.2. Cet injecteur admet deux débits de sortie dont un principal circulaire et un secondaire en anneau. L'injecteur principal circulaire est celui qui débite l'air avec les particules d'aluminium et a un rayon de 16,5 mm. Le second en anneau débite un mélange de méthane et d'air à richesse 0,8 pour mettre en place une flamme pilote annulaire qui maintient la flamme aluminium-air stable. La section annulaire a une largeur de 1,5 mm.

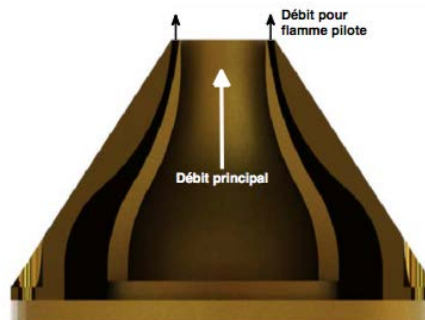


FIGURE 6.2 – Schéma de la sortie du brûleur (image extraite de [66])

Avant sa sortie du brûleur, l'écoulement subit une contraction due à la variation de section de l'injecteur qui passe d'un rayon de 36,0 mm à 16,5 mm. Cette contraction a pour effet d'écraser la couche limite et d'obtenir un profil de vitesse plat en sortie du brûleur. Ce profil de vitesse plat est nécessaire pour avoir une concentration de particules constante dans le plan de sortie du brûleur et limiter la variation de richesse due à l'écoulement. Le profil d'écoulement en sortie du brûleur est illustré en Fig. 6.3. Cette courbe est obtenue par vélocimétrie par image des particules. Ces particules sont éclairées par un faisceau laser pulsé ce qui va permettre de les suivre au cours du temps et de mesurer leur vitesse. Les particules ayant un faible nombre de STOKES (Keane et Adrian, 1993) [55], elles ont peu d'inertie et leur vitesse est celle de l'écoulement.

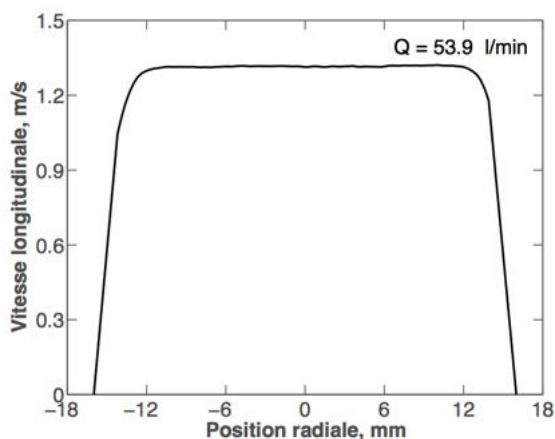


FIGURE 6.3 – Moyenne temporelle du profil de vitesse de l'écoulement à la sortie du brûleur pour un débit de $53,9 \text{ l}\cdot\text{min}^{-1}$ (image extraite de [66])

6.1.1.3 Générateur d'aérosol

Dans l'ensemble des travaux sur les flammes aluminium-air de type « bec Bunsen », le générateur d'aérosol est important pour l'expérience car la quantité d'aluminium doit être précise et stable. Ce dispositif expérimental utilise un générateur d'aérosol du commerce, Palas BEG 1000, qui a plusieurs avantages. Premièrement, il effectue une dispersion en deux étapes. Comme l'illustre la Fig. 6.4, la poudre d'aluminium est initialement dans un réservoir agité d'une capacité de 2 kg et il est libérée progressivement sur un tapis roulant. Au bout de ce tapis roulant se situe une brosse tournante qui va entraîner les particules dans la chambre à dispersion. Cette chambre est connectée d'un côté à la pression atmosphérique et de l'autre à une buse d'éjection Venturi. Ainsi, via un débit d'air contrôlé, on génère une dépression engendrant un écoulement d'air qui va traverser la chambre et emporter les particules d'aluminium. Le second avantage est l'autonomie que confère son réservoir à l'appareil, celui-ci pouvant être rempli de poudre d'aluminium durant une expérience.

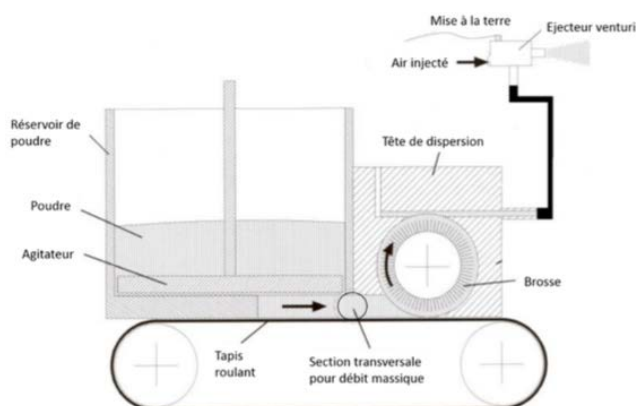


FIGURE 6.4 – Schéma du générateur d'aérosol (image extraite de [66])

6.1.1.4 Poudre d'aluminium utilisée

La poudre d'aluminium qui alimente le brûleur est une poudre dont le diamètre moyen de SAUTER est de $7,1\ \mu\text{m}$. Ce choix a été fait en fonction des données de la littérature concernant l'étude d'explosions à volume constant réalisées avec d'autres granulométries. Cette distribution présente le meilleur compromis entre la vitesse de propagation de la flamme et le taux de sédimentation. La Fig. 6.5 donne la distribution de taille des particules injectées dans la flamme.

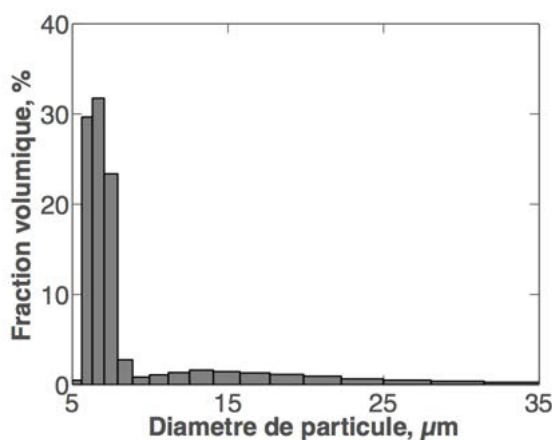


FIGURE 6.5 – Distribution de la taille des particules de la poudre utilisée (image extraite de [66])

6.1.1.5 Procédure d'allumage de la flamme aluminium-air

L'allumage de cette flamme aluminium-air suit une procédure particulière en raison de la température importante à laquelle l'aluminium fond. Initialement, le brûleur génère une flamme méthane-air de richesse 0,8. Ensuite, un nuage de particules d'aluminium est injecté progressivement, ce qui permet une inflammation de l'aluminium dispersé. L'obtention de cette flamme de structure hybride est suivie d'une réduction du débit de méthane jusqu'à sa coupure totale pour obtenir une flamme aluminium-air pure auto-entretenu. La flamme guide annulaire permet d'accrocher la flamme au brûleur et contribue à sa stabilité.

6.1.2 Résultats de l'étude

6.1.2.1 Structure de la flamme

La Fig. 6.6 est une tomographie par plan laser d'une flamme aluminium-air de richesse 1,22. Comme prévu, la flamme est en forme de cône et elle est attachée aux extrémités par la flamme guide annulaire. La tomographie révèle des zones intéressantes dans la flamme. À l'intérieur et à l'extérieur de la flamme, la tomographie révèle la présence de phases condensées. Elle s'explique par la présence de l'aluminium solide dans les gaz frais et l'alumine liquide dans les gaz brûlés. Entre ces deux zones se situe une zone sombre qui met en évidence une expansion des gaz chauds et l'absence de phase condensée. Cette zone peut alors être considérée comme le lieu où ont lieu les réactions de combustion. Dans la zone des gaz brûlés, on observe des particules très lumineuses et donc la présence d'une phase condensée. Cela peut s'expliquer par l'agglomération des particules nanométriques d'alumine en particules micrométriques.

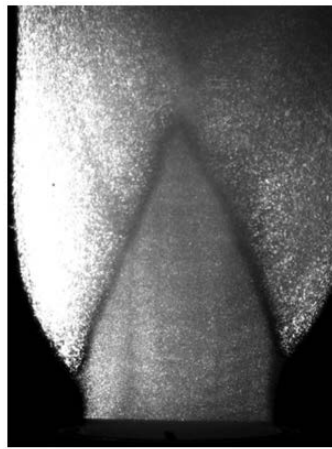


FIGURE 6.6 – Tomographie par plan laser d'une flamme aluminium-air de richesse 1,22 [66]

Des battements et instabilités peuvent être présents le long de la flamme. La Fig. 6.7 illustre le déplacement d'une instabilité jusqu'au sommet de la flamme. Des perturbations sont aussi présentes au sommet de la flamme et sont amplifiées à cause du flux diffusif de chaleur qui augmente la vitesse de la flamme dans cette zone.

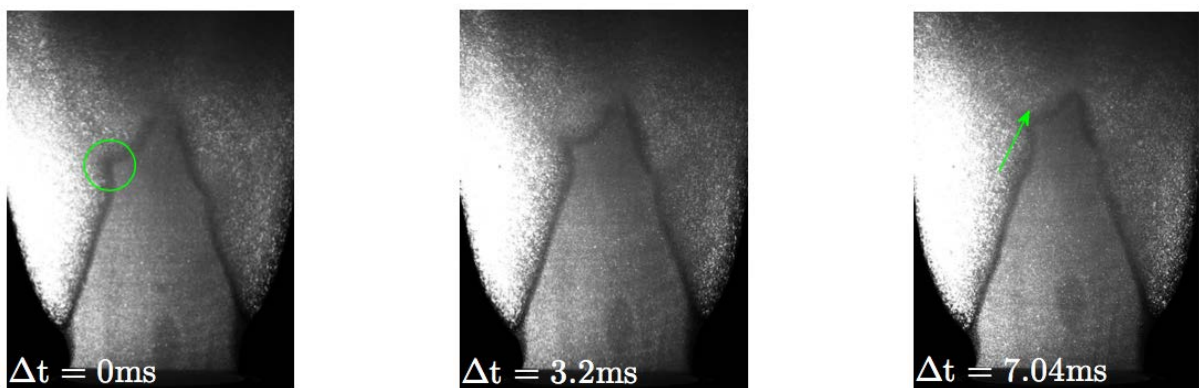


FIGURE 6.7 – Séquence d'images par tomographie par plan laser d'une flamme aluminium-air de richesse 0,99 montrant la propagation d'une instabilité [66]

6.1.2.2 Température de flamme

La température de la flamme est estimée à partir du spectre émis par cette dernière. Ce spectre d'émission subit alors des traitements pour isoler les signatures de la contribution des espèces gazeuses pour ensuite calculer la température associée aux émissions de l'espèce $\text{AlO}_{(g)}$. Ainsi pour chaque essai, la température de la phase gazeuse est établie par la moyenne de 100 acquisitions. La Fig. 6.8 illustre les mesures de la température de flamme de chaque essai pour différentes concentrations d'aluminium. Ces mesures montrent une température moyenne de flamme de 3146 K avec un intervalle de confiance à 95% de ± 180 K dû aux incertitudes de la mesure. La tendance de la température de flamme dans la plage de mesure semble indiquer une indépendance à la concentration.

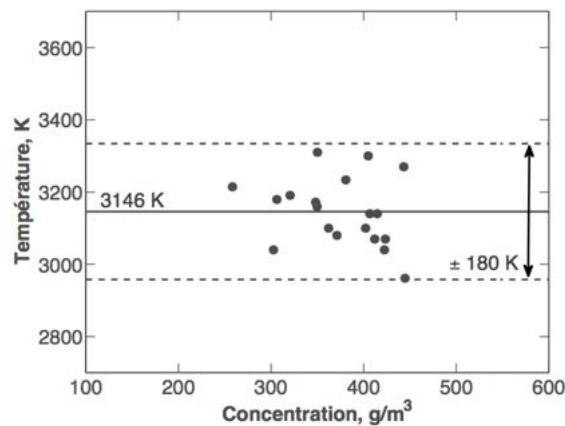


FIGURE 6.8 – Température de flamme en fonction de la concentration d'aluminium pour des aérosols aluminium-air [66]

6.1.2.3 Vitesse de flamme

La vitesse de la flamme est mesurée à partir de deux méthodes. La première est faite grâce à un traitement des tomographies par plan laser qui permet d'obtenir un champ de vitesse moyen. Ainsi la vitesse de la flamme est identifiée comme étant la vitesse perpendiculaire au front de flamme. La seconde méthode est la visualisation directe par mesure des émissions de l'espèce $\text{AlO}_{(g)}$ accompagnée de traitements d'images. La Fig. 6.9 présente les mesures des vitesses de flamme en fonction de la concentration en poudre d'aluminium à partir des deux méthodes de mesure. Ces deux méthodes ne mesurent pas la même zone, l'un mesure le déplacement de la zone sombre et l'autre le déplacement de la zone d'émission de l'espèce $\text{AlO}_{(g)}$. Ainsi une différence est constatée entre les deux méthodes de mesure de la vitesse de flamme qui avoisine 20 % pour une vitesse moyenne de $28,5 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ avec la mesure tomographique.

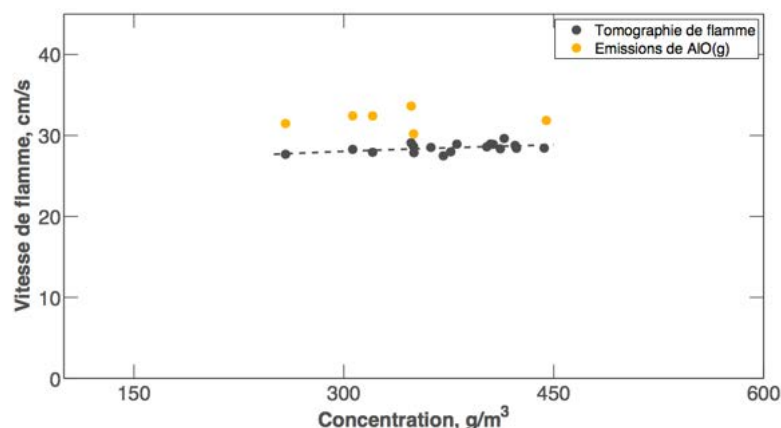


FIGURE 6.9 – Vitesse de flamme obtenue par tomographie et par visualisation directe en fonction de la concentration en poudre d'aluminium pour des flammes d'aluminium-air [66]

6.2 Mise en place de la simulation 2D

6.2.1 Domaine de calcul

La flamme dans les travaux de R. LOMBA a une hauteur de 4 cm. La Fig. 6.10 représente le domaine de calcul utilisé par rapport à la sortie du brûleur expérimental. La simulation de la flamme d'aluminium-air est 2D plane. Le domaine ne prend en compte que la moitié droite de la flamme, ce qui amène à diviser par deux le temps de calcul. Il prend en compte la présence de l'injecteur secondaire qui permet de mettre en place la flamme pilote du cas expérimental. La flamme pilote devait être simulée simplement en n'utilisant aucun schéma réactionnel. Les gaz brûlés de la flamme devaient être injectés directement dans le domaine de calcul avec une température et une vitesse égales à celles des gaz émis par la flamme pilote. Malheureusement il n'a pas été possible d'obtenir numériquement une flamme stable tout en simulant la flamme pilote, ce qui nous a conduit à annuler l'injection des gaz brûlés de la flamme pilote par la suite, tout en gardant l'injecteur secondaire. Néanmoins une faible injection d'air est maintenue dans cet injecteur pour permettre une bonne circulation de l'écoulement en sortie d'injecteur. Le domaine 2D de calcul contient une large surface autour de la flamme qui permet une analyse de l'évolution de l'alumine liquide et des produits de combustion loin de la flamme.

Le maillage du domaine est illustré en Fig. 6.11. La moitié de l'injecteur principal débitant l'air et l'aluminium solide est présente et a une largeur de 16,5 mm. L'injecteur secondaire a une largeur de 1,5 mm. La sortie du brûleur se trouve 10 mm au-dessus de la limite basse du domaine. Ce dernier couvre par ailleurs une zone qui s'étend horizontalement de l'axe de symétrie jusqu'à 20 mm à droite du brûleur et verticalement sur 100 mm à partir de la sortie du brûleur. Comme cela peut être constaté sur cette figure, la taille des mailles n'est pas homogène dans l'ensemble du domaine. Ces dernières sont plus petites dans la zone où se trouve la flamme. Ainsi la taille des mailles atteint un maximum de 1 mm dans les zones où il n'est pas nécessaire d'avoir une résolution élevée et est de 0,05 mm à l'emplacement de la flamme. La taille des plus petites mailles a été choisie par rapport aux conclusions tirées des cas 1D du chapitre 5 qui a montré que cette résolution permettait d'être indépendant du maillage (voir la section 5.2.3). Le maillage qui en résulte contient 317 663 mailles et modélise une surface de 37,5 cm².

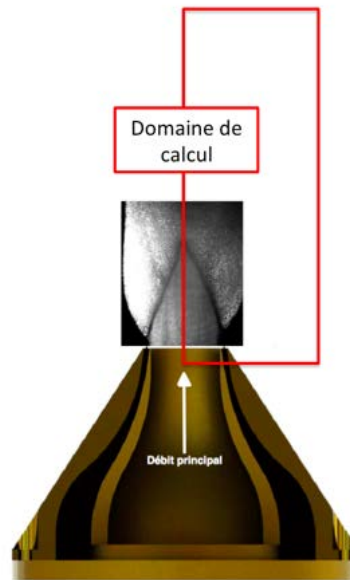


FIGURE 6.10 – Domaine de calcul pour la modélisation de la flamme 2D et comparaison avec la taille de la flamme obtenue expérimentalement [66]

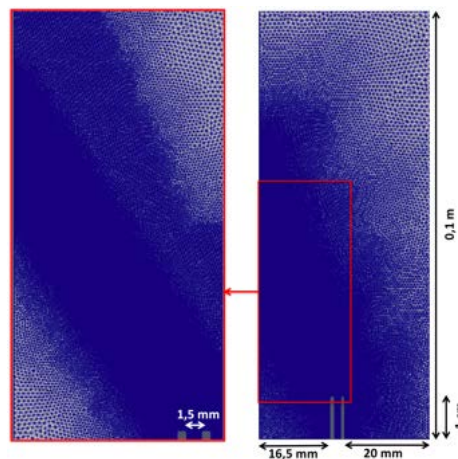


FIGURE 6.11 – Maillage du domaine de calcul avec un zoom sur la zone de raffinement où la flamme devrait être localisée

Les zones de raffinement du maillage sont illustrées par le schéma de la Fig. 6.12. Tout comme la flamme expérimentale, la flamme simulée devrait avoir une hauteur avoisinant 4 cm en partant du sommet du brûleur. Pour bien capturer la flamme, une bande de 2,5 cm de large, très résolue, est définie. Cette zone est entourée par une autre zone de maillage dont la résolution est intermédiaire. Elle permet d'anticiper les mouvements de la flamme et d'éviter que celle-ci se localise dans des zones faiblement résolues. La zone intermédiaire s'étend dans la partie à droite du domaine, partie où la flamme n'apparaît pas. Cette extension est faite à cause des réactions de combustion qui peuvent avoir lieu en conséquence de la condensation de l'alumine et de la fuite d'alumine gazeuse qui sera mise en avant dans la section 6.3.4. La figure présente aussi les différentes conditions aux limites appliquées dans ce calcul pour la phase gazeuse. Les limites à gauche et à droite du domaine font intervenir une condition de symétrie classique. La limite supérieure du domaine est représentée

par une condition de sortie qui permet d'imposer la pression statique. La limite inférieure du domaine est divisée en 3 parties qui sont représentées par le même type de condition limite d'entrée. Cette condition aux limites permet d'imposer les composantes de vitesse, la température statique et les fractions massiques à une entrée. La relaxation est faite de manière analogue à ce qui est fait pour la sortie. Les parois du brûleur sont représentés par une condition limite de mur adiabatique avec une vitesse nulle à sa surface. Comme pour la phase gazeuse, la phase dispersée est soumise à des conditions limites. L'ensemble des bordures du domaine, sauf la limite gauche, sont représentées par une simple condition de sortie des particules. La limite à gauche du domaine est représentée par une condition de rebond élastique des particules. Ainsi les particules qui entrent en contact avec cette limite ont un vecteur vitesse qui subit une symétrie plane, ce qui les renvoie à l'intérieur du domaine. Cette condition aux limites est aussi appliquée sur les parois du brûleur.

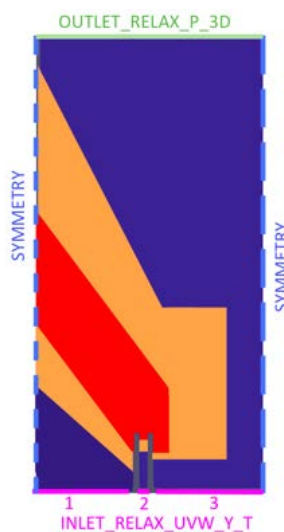


FIGURE 6.12 – Conditions aux limites du domaine de calcul et zones de raffinement du maillage (bleu : grossier [1 mm], orange : intermédiaire [0,2 mm], rouge : fin [0,05 mm])

6.2.2 Injection des particules et de l'air

Contrairement à l'analyse faite pour la flamme 1D du chapitre 5, la modélisation de la flamme 2D ne contiendra qu'un unique cas d'étude. La flamme analysée est stœchiométrique avec une température initiale des particules et de l'air de 300 K. La flamme de référence provenant des travaux de R. LOMBA est alimentée par une poudre d'aluminium avec une distribution de taille restreinte. La taille des particules avait une moyenne de $7\ \mu\text{m}$ avec très peu de particules nanométriques et quelques particules dont la taille avoisinait la dizaine de micromètres. Pour simplifier l'étude, la modélisation de la flamme 2D aluminium-air utilise des particules d'aluminium dont la distribution de taille est monodispersée avec une taille de $7\ \mu\text{m}$.

La flamme modélisée étant stœchiométrique, la concentration d'aluminium à injecter avec l'air à 300 K est de $293,33\ \text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. L'injection de l'air et de l'aluminium se fait au niveau de la condition d'entrée située dans l'injecteur principal. De façon à reproduire le plus fidèlement possible l'expérience d'origine, un profil de vitesse verticale est imposé. Avec ce dernier, la vitesse est constante et égale à la vitesse maximale, V_{max} , sur la majeure partie de la largeur de l'injecteur puis diminue près de sa paroi. La vitesse d'injection V_{max} ne sera pas la même entre la simulation et l'expérience, malgré une vitesse de flamme, une hauteur de flamme et une largeur d'injecteur primaire proche pour les 2 cas. Cette différence vient de la forme de la section de sortie de l'injecteur qui est circulaire pour le cas expérimental et rectangulaire pour le cas numérique 2D. La vitesse d'injection est alors plus faible numériquement qu'expérimentalement. La vitesse maximale atteinte passe de $1,31\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ à $0,87\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Les particules sont injectées avec l'air mais il a été choisi de ne pas les injecter sur toute la largeur de l'injecteur. La Fig. 6.13 est un extrait de la modélisation de la flamme 2D avec un zoom

sur l'intérieur de l'injecteur principal du brûleur où les particules suivies sont affichées en blanc. On constate que l'injection ne se fait pas près de la paroi. La distance entre les particules et la paroi est constante le long du brûleur et s'évalue à 2 mm. Ce choix a été fait car la réduction de vitesse en proche paroi permettait à la flamme de se propager à l'intérieur du brûleur. D'autres alternatives ont été testées, comme représenter la paroi comme une paroi isotherme à 300 K, de façon à refroidir le mélange et étouffer la combustion. Cependant, cela n'a pas corrigé le problème voire a introduit de nouvelles difficultés comme une condensation excessive de l'alumine gazeuse au pied de la flamme qui conduisait à une libération de chaleur trop grande près de la paroi.



FIGURE 6.13 – Zoom sur l'intérieur de l'injecteur principal du brûleur pour la modélisation de la flamme 2D aluminium-air (points blancs : présence de la phase dispersée dans la maille.)

L'injection des particules d'aluminium de $7\ \mu\text{m}$ s'accompagne de l'injection de germes d'alumine. Comme cela a été vu dans le chapitre 5, l'influence du rapport R_{germe} sur la flamme est important pour des particules de taille inférieure à $5\ \mu\text{m}$. Mais pour des particules d'aluminium d'une taille de $7\ \mu\text{m}$, l'influence du rapport R_{germe} est moindre pour une valeur comprise entre 0,5 et 5. Ainsi la flamme 2D est modélisée avec un rapport $R_{germe} = 1$ qui se résume à l'injection d'un germe nanométrique d'alumine par particule d'aluminium.

La concentration d'aluminium étant choisie pour respecter la stœchiométrie, le choix du nombre du nombre de particules virtuelles par particule suivie doit être fait. Pour le cas des flammes 1D, il a été vu qu'un nombre de 5 particules suivies par maille dans les gaz frais était suffisant pour résoudre correctement la flamme. La taille des mailles du cas 2D variant d'une zone à l'autre du maillage, la concentration en particules suivies doit être déterminée à partir de la taille des mailles dans la zone la mieux résolue. Pour avoir un bon compromis entre la résolution de la phase dispersée dans le maillage et le temps de calcul, on se limitera à environ 4 particules suivies par maille dans les gaz frais au niveau de la zone finement maillée. Dans la zone où la résolution du maillage est intermédiaire, ce choix permet d'avoir d'avoir 15 particules suivies par maille. Au niveau de l'injection de l'air et des particules, le maillage est grossier ce qui permet d'avoir 75 particules suivies par maille.

6.2.3 Initialisation de la flamme

L'initialisation de la flamme 2D suit une démarche proche de celle appliquée pour le cas 1D présenté dans le chapitre 5 en utilisant l'azote, qui est une espèce passive du schéma réactionnel. L'azote est initialement contenu dans la zone associée aux gaz brûlés et est en contact avec une zone contenant de l'air avec des particules d'aluminium et des germes d'alumine. La Fig. 6.14 représente ces zones dans le domaine de calcul. La zone contenant l'azote sera à 3500 K. Les transitions entre les zones de température et de composition différentes se font avec une évolution progressive. L'aluminium s'évaporer progressivement dans cette zone de transition et produira de l'aluminium gazeux qui réagira ensuite avec l'oxygène de l'air.

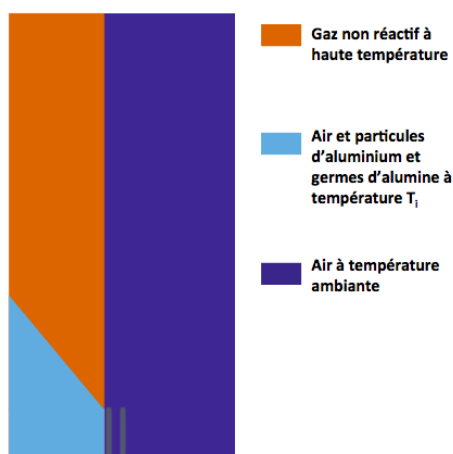


FIGURE 6.14 – Schéma de l'initialisation de la flamme 2D aluminium-air en utilisant une espèce passive telle que l'azote

Comme pour le cas 1D, l'initialisation ne peut pas être faite à une température T_i de 300 K. Cette température est trop faible et elle entraîne l'apparition de gradients de pression et de vitesse très raides qui provoquent des instabilités numériques nuisant à la robustesse du calcul. Une démarche de réduction de température a été mise en œuvre de façon à faire passer progressivement la température T_i de 900 K à 600 K et enfin à 300 K. Pour chacune des étapes de réduction de la température, la flamme va devoir être stœchiométrique et stationnaire avec une hauteur proche de 4 cm. Ainsi la vitesse d'injection de l'air et le débit des particules d'aluminium et des germes d'alumine sont ajustés pour respecter ces critères.

Les étapes de réduction de la température sont effectuées sur un maillage grossier de façon à réduire grandement les temps de calculs. Ainsi la taille minimale des mailles dans la zone de la flamme est égale à 0,2 mm, ce qui réduit le nombre de mailles d'un facteur 4,7. Ce changement de maillage permet de réduire le nombre de particules suivies par maille d'un facteur 3. La résolution réduite du maillage ne permet plus de résoudre directement la flamme et tend à nuire à la robustesse des simulations. De ce fait, une méthode d'épaississement de flamme est appliquée et la vitesse de la flamme est réduite artificiellement pendant les étapes de réduction de la température en diminuant la vitesse d'évaporation des particules d'aluminium. Ceci est fait en modifiant les nombres de PRANDTL et de SCHMIDT qui paramètrent le modèle d'évaporation de SPALDING. Ainsi en diminuant d'un facteur 3,5 la vitesse d'évaporation des particules, il est possible d'obtenir, sur le maillage grossier, une flamme 2D aluminium-air alimentée par des gaz frais à 300 K par la réduction progressive de la température de ces derniers. La Fig. 6.15 représente l'évolution de la flamme 2D aluminium-air stœchiométrique et stationnaire au cours de la diminution de la température T_i . La figure représente le champ de température de la phase gazeuse dans l'ensemble du domaine de calcul. Le temps moyen nécessaire aux étapes de réduction progressive de la température est estimé à environ 55 000 heures de calcul.

À la fin de la procédure de réduction de la température, la flamme 2D obtenue est stœchiométrique, stationnaire et est alimentée par des gaz frais à 300 K. Son calcul est cependant réalisé sur le maillage grossier. Il reste donc encore à transposer cette simulation sur le maillage fin d'origine en rétablissant les valeurs du nombre de particules suivies par maille et des paramètres du modèle d'évaporation définies dans la section 6.2.1 et 6.2.2. Ces modifications ne sont pas effectuées en même temps, mais sont mises en place l'une après l'autre. Dans un premier temps, le nombre de particules suivies dans les gaz frais est augmenté. Ensuite, la solution de la flamme 2D est interpolée sur le maillage fin. Pour finir, le changement des nombres de PRANDTL et de SCHMIDT est fait pour retrouver la vitesse d'évaporation correspondant à l'évaporation des particules d'aluminium dans l'air. Le changement des paramètres va accélérer la flamme, ce qui conduit à modifier la vitesse d'injection de l'air et des particules pour garder une flamme stœchiométrique et stationnaire avec une hauteur proche de 4 cm. Cependant, ce changement provoque des déformations de la flamme qui s'accroissent au cours

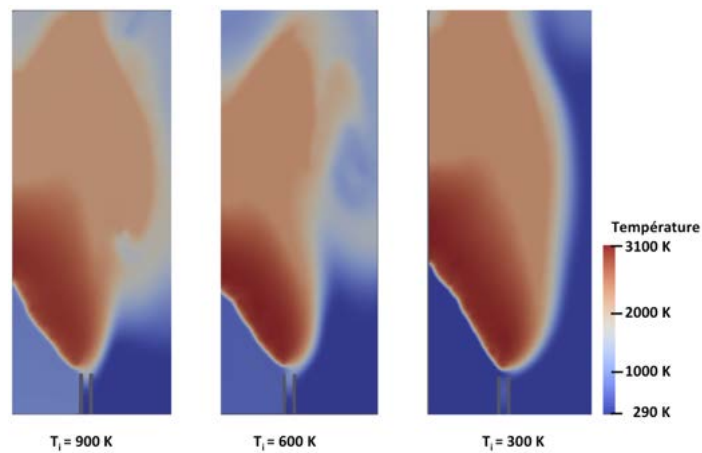


FIGURE 6.15 – Visualisation de la flamme 2D aluminium-air en fonction de T_i avec l’affichage de la température de la phase gazeuse

du temps. Elles font ainsi sortir cette dernière de la zone où elle est résolue ce qui entraîne des problèmes de robustesse de la simulation. Pour éviter ces effets indésirables et réduire fortement ces déformations, de la viscosité artificielle est utilisée dans l’ensemble du domaine. La Fig. 6.16 représente l’évolution de la flamme 2D aluminium-air stœchiométrique et stationnaire en fonction de l’augmentation de la viscosité artificielle. L’augmentation de la viscosité artificielle conduit à amortir les déformations de la structure de la flamme. Ainsi en augmentant la viscosité, la flamme va se stabiliser progressivement et devenir de plus en plus lisse. Une fois que la structure de la flamme est suffisamment lisse, la viscosité artificielle est progressivement retirée. La flamme obtenue est étudiée dans la section 6.3. Le coût de cette démarche qui suit les étapes de réduction de la température des gaz frais est grand et avoisine 220 000 heures de calcul sur le supercalculateur Olympe de CALMIP (Calcul en Midi-Pyrénées).

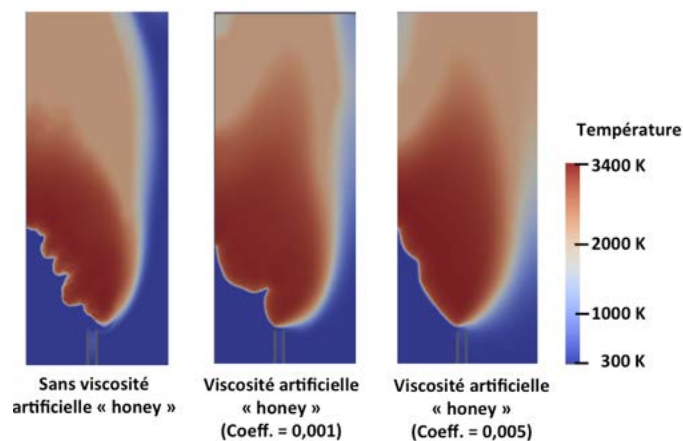


FIGURE 6.16 – Visualisation de la flamme 2D aluminium-air en fonction de l’augmentation de la viscosité artificielle

6.3 Flamme stœchiométrique aluminium-air

La flamme 2D aluminium-air obtenue à partir de la démarche d'initialisation est présentée dans cette section. Cette flamme est stœchiométrique et stationnaire avec une injection de particules d'aluminium et d'air à 300 K. L'injection dans l'injecteur principal se fait avec une vitesse V_{max} de $0,875 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Les particules d'aluminium ont une taille unique de $7 \mu\text{m}$ et sont injectées avec un débit de $3,73 \text{ g}\cdot\text{s}^{-1}$ pour être à la stœchiométrie. Pour permettre d'avoir un nombre suffisant de particules d'aluminium suivies par maille dans la zone raffinée de la flamme, le nombre de particules virtuelles par particule suivie $N_{v,p}$ est égal à 740,79. Lors de l'injection des particules d'aluminium, des germes d'alumine sont aussi injectées. Ces germes d'alumine ont une taille de 1 nm et sont injectés avec un débit massique de $14,65 \text{ pg}\cdot\text{s}^{-1}$ qui correspond à un rapport R_{germe} de 1. De même, ce rapport impose $N_{v,g} = N_{v,p}$ puisque les nombres réels de particules d'aluminium et de germes d'alumine sont identiques dans les gaz frais.

Différentes analyses seront faites sur cette flamme 2D. Pour la phase gazeuse, on s'intéressera à l'évolution de la température, de la vitesse et du taux de dégagement de chaleur provenant des réactions de combustion. Pour la phase dispersée, comprenant l'aluminium et l'alumine, l'évolution de la température et de la taille des particules sera étudiée.

6.3.1 Température du gaz

La Fig. 6.17 présente le champ de température de la phase gazeuse à travers la flamme 2D aluminium-air. Cette flamme part du sommet de l'injecteur principal et atteint la limite gauche du domaine avec une hauteur de flamme égale à 3,1 cm. La température du gaz augmente rapidement à travers la flamme jusqu'à atteindre une température de l'ordre de 3390 K sur la majeure partie de la flamme. Des températures plus importantes sont atteintes au niveau du sommet de la flamme où elle avoisine 3565 K. Ces variations de température sont dues à une oscillation du sommet de la flamme qui conduit à une combustion rapide d'un grand nombre de particule et à une augmentation significative du taux de dégagement de chaleur. Ce phénomène est mis en avant dans la section 6.3.5.

Lorsqu'on s'éloigne horizontalement de la flamme (vers la droite de la figure), les gaz se refroidissent au contact de l'air à 300 K. Lorsqu'on s'éloigne verticalement de la flamme (vers le haut de la figure), les gaz se refroidissent également mais cela n'est pas provoqué par le contact avec l'air. Le refroidissement est causé par le rayonnement des gouttes d'alumine. Dans cette zone, la taille des gouttes d'alumine et donc leur surface d'échange sont suffisamment grandes pour que les pertes thermiques par rayonnement soient significatives. Ce refroidissement des gouttes d'alumine conduit à une baisse de la température de la phase gazeuse. Ainsi la température des gaz diminue de 3387 K au niveau de la flamme à 2370 K près de la partie supérieure du domaine.

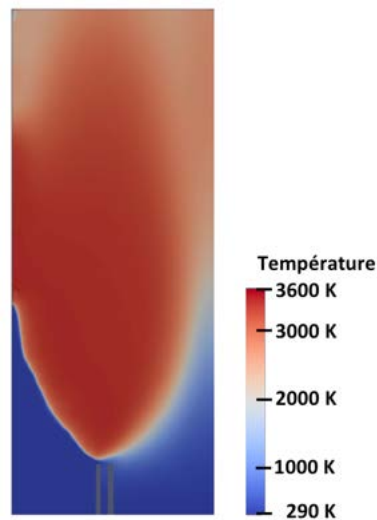


FIGURE 6.17 – Température de la phase gazeuse à travers la flamme aluminium-air

6.3.2 Vitesse du gaz

La Fig. 6.18 représente l'évolution de la norme de la vitesse de la phase gazeuse à travers la flamme 2D aluminium-air. Initialement, les gaz frais arrivent verticalement vers la flamme avec une vitesse de $0,875 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Au niveau de la flamme, l'écoulement du gaz est dévié et une expansion des gaz chauds a lieu. Cette expansion augmente la norme de la vitesse pour atteindre une valeur avoisinant $4,2 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Cette vitesse varie légèrement le long de la flamme à cause des petites déformations présentes sur sa structure. Lorsque cette valeur est comparée à celle obtenue pour le cas 1D dans le chapitre 5, on constate que les gaz brûlés sont plus rapides de $1,2 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ pour la cas 2D que pour le cas 1D.

La déviation de l'écoulement à travers la flamme conduit à une zone où la vitesse est faible. La zone se localise le long du bord gauche du domaine en partant du sommet de la flamme et s'élargit en s'éloignant verticalement de la flamme. La vitesse dans cette zone tend vers une valeur nulle au bord gauche du domaine, sauf dans le coin supérieur gauche avec l'apparition d'une singularité dont l'origine est inconnue. Cette singularité provoque un saut de norme vitesse à $6,1 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, mais elle est rapidement amortie et ne perturbe pas l'ensemble du domaine.

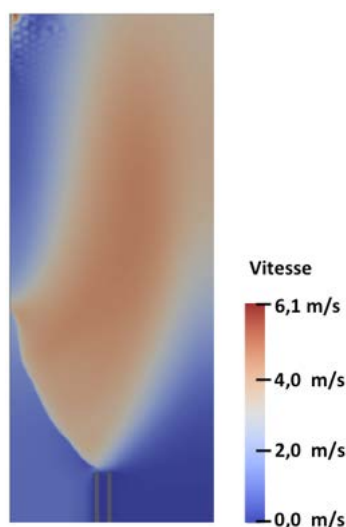


FIGURE 6.18 – Norme de la vitesse de la phase gazeuse à travers la flamme aluminium-air

6.3.3 Particules d'aluminium

Les évolutions du diamètre et de la température des particules d'aluminium à travers la flamme sont représentées respectivement par les Figs. 6.19 (a) et (b). Comme pour l'évolution de la température de la phase gazeuse, ces graphiques dessinent la structure de la flamme. Le graphique affichant l'évolution de la température des particules nous informe en plus sur l'épaisseur de la flamme. Comme cela a été vu dans les chapitres 4 et 5, la cinétique de la combustion diphasique est limitée par l'évaporation de l'aluminium. Ainsi, l'épaisseur de flamme peut être assimilée à la distance entre la position du début de l'échauffement des particules d'aluminium et celle de leur évaporation totale. Pour notre cas, l'épaisseur de la flamme 2D aluminium-air avoisine 1,3 mm. Dans cette épaisseur, l'aluminium solide chauffe jusqu'à sa température de fusion qui est de 933 K pour ensuite changer de phase. Une fois liquide, l'aluminium continue de chauffer, tout en s'évaporant progressivement, pour atteindre une température proche de 2400 K. La vitesse d'évaporation augmente avec la température jusqu'à la disparition totale de la goutte d'aluminium.

Une analyse de la résolution des simulations peut être faite à partir de ces figures. La projection des particules lagrangiennes suivies sur le maillage eulérien nous permet de mettre avant des mailles vides de particules suivies. S'il n'y a pas de particule suivie dans la maille, les Figs. 6.19 (a) et (b) affichent respectivement 0 μm et 0 K. Lors de l'injection des particules d'aluminium, le nombre $N_{v,p}$ de particules virtuelles par particule suivie a été choisi pour avoir un nombre suffisant de particules suivies dans la maille raffinée de la flamme du côté des gaz frais. On constate que pour les zones proches de l'injecteur et dans la zone intermédiaire, toutes les mailles ont au moins une particule suivie. Pour la zone raffinée, quelques mailles sans particule apparaissent progressivement lorsqu'on s'enfonce dans la flamme. Cette diminution du nombre $N_{s,p}$ de particules suivies par maille est liée à l'accélération des gaz à travers la flamme. Ainsi le nombre $N_{v,p}$ de particules virtuelles par particules suivies, défini pour les gaz injectés à une vitesse de $0,875 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, est trop grand dans la flamme. Mais ce choix de $N_{v,p}$ reste un bon compromis entre la résolution et le temps de calculs. Le nombre de mailles sans particule reste raisonnable et l'étude sur les flammes 1D nous a montré que ce faible nombre de mailles sans particules n'influence pas la flamme.

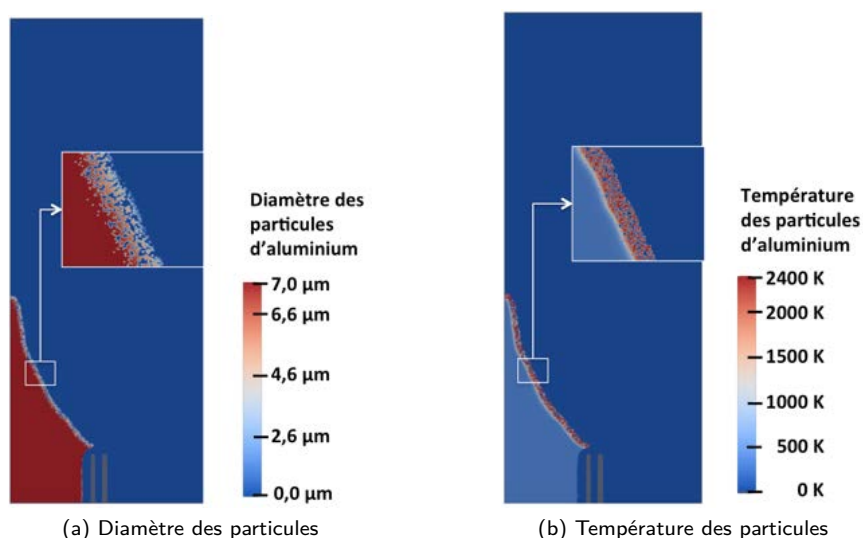


FIGURE 6.19 – Évolution des caractéristiques des particules d'aluminium à travers la flamme 2D aluminium-air

6.3.4 Particules d'alumine

L'évolution du diamètre et de la température des particules d'alumine sont représentés respectivement par les Figs. 6.20 (a) et (b). Contrairement à l'aluminium, l'alumine est présente en phase dispersée dans l'air sous forme de germes et dans les gaz brûlés sous la forme de gouttes. La température des germes d'alumine est initialement de 300 K dans l'injecteur principal. Lorsque les germes arrivent au niveau de la flamme, leur température augmente rapidement à 2370 K. À cette température, l'alumine passe de l'état solide à liquide. La goutte d'alumine continue à chauffer jusqu'à atteindre la température des gaz brûlés qui est de 3365 K. La température des gouttes diminue ensuite en s'éloignant de la flamme. Certaines gouttes d'alumine se trouvent dans des gaz qui vont se mélanger avec de l'air à 300 K, voire directement avec de l'air à 300 K et vont donc se refroidir au contact du gaz. Pour les gouttes d'alumine qui s'éloignent verticalement de la flamme, la diminution de leur température est provoquée par les pertes thermique par rayonnement. Les particules vont se refroidir et atteindre la température de 2370 K à laquelle elles se solidifient. L'alumine passe progressivement de l'état liquide à l'état solide mais le domaine n'est pas assez haut pour que le changement de phase soit totalement fait. Néanmoins, une petite zone dans le coin supérieur gauche du domaine semble contenir de l'alumine solide.

Le diamètre des particules d'alumine évolue à travers la flamme. Elles sont initialement injectées avec une taille égale à 1 nm. À l'approche de la flamme, elles grossissent rapidement dans le front de flamme pour atteindre un diamètre avoisinant 6,8 µm dans les gaz brûlés. Mais cette taille de goutte d'alumine n'est pas la même dans l'ensemble des gaz brûlés. En s'éloignant de la flamme verticalement (vers le haut de la figure), l'alumine gazeuse se condense au fur et à mesure que le milieu tend vers l'équilibre et que la température diminue sous l'effet du rayonnement de l'alumine. Le diamètre des gouttes d'alumine augmente légèrement en montant en hauteur. En s'éloignant de la flamme horizontalement (vers la droite de la figure), on constate que l'alumine atteint une grande taille avoisinant 15,2 µm pour les gouttes en contact avec l'air à 300 K. Cet accroissement de la taille des particules est une conséquence de deux effets. Premièrement, la présence des gaz brûlés à basse température pousse l'alumine gazeuse à se condenser et à déplacer l'équilibre chimique vers la production d'alumine. Deuxièmement, une forte proportion massique d'alumine gazeuse s'échappe de la flamme par l'espace entre le pied de flamme et le sommet de l'injecteur principal. La Fig. 6.21 représente l'évolution de la fraction massique d'alumine gazeuse dans le domaine et met en évidence ce phénomène. À travers la flamme, l'alumine gazeuse est produite et est rapidement condensée sur les germes d'alumine. Mais au niveau du pied de la flamme, il y a une déviation de l'écoulement induite par l'accélération des gaz brûlés par la flamme. Cette déviation est responsable de l'existence d'alumine gazeuse dans des mailles qui ne contiennent pas de particule d'alumine et dans lesquelles l'alumine gazeuse ne peut pas se condenser. Ainsi le long de l'interface entre les gaz brûlés et l'air à 300 K se trouve de l'alumine gazeuse. Cette alumine gazeuse

va progressivement diffuser de part et d'autre de l'interface et va pouvoir se condenser en partie sur les gouttes d'alumine présentes dans les gaz brûlés.

Comme pour l'analyse de l'aluminium, les Figs. 6.20 (a) et (b) nous permettent d'évaluer la résolution de la phase dispersée dans la zone de la flamme. Pour le cas de l'alumine, les particules ne s'évaporent pas et sont présentes derrière le front de flamme. Ainsi on s'aperçoit que le nombre $N_{v,g}$ de particules virtuelles par particule suivie est trop grand dans la flamme puisque de nombreuses mailles ne contiennent pas de particule suivie. Néanmoins le choix du nombre $N_{v,g}$ reste un bon compromis entre la résolution et le temps de calcul. Dans les zones grossières et intermédiaires, aucune maille contenant des gaz frais ou des gaz brûlés n'est exempte de particule suivie d'alumine. Il faudrait réduire le nombre $N_{v,g}$ d'un facteur 10 pour remplir la totalité des mailles dans la zone raffinée, ce qui provoquerait une importante augmentation du temps de calcul. Par ailleurs, la réduction du nombre $N_{v,g}$ n'aurait que peu d'effet sur les résultats comme cela a été vu pour les cas 1D à la section 5.6.1 du chapitre 5.

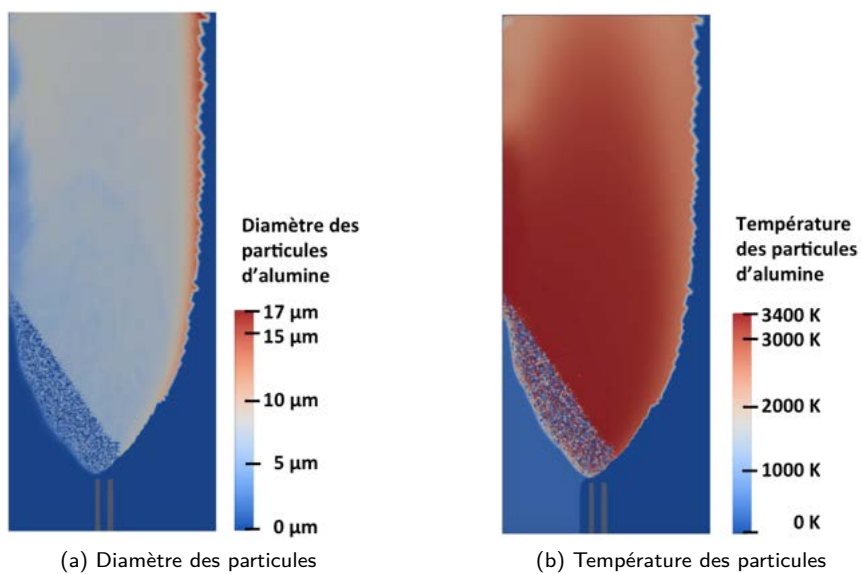


FIGURE 6.20 – Évolution des caractéristiques des particules d'alumine à travers la flamme 2D aluminium-air

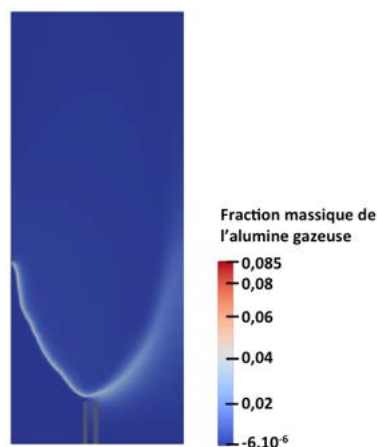


FIGURE 6.21 – Fraction massique d'alumine gazeuse dans le domaine de calcul

6.3.5 Taux de dégagement de chaleur lié aux réactions de combustion

L'évolution du taux de dégagement de chaleur à travers la flamme est représentée sur la Fig. 6.22. Comme pour l'évolution de la température de l'aluminium, le taux de dégagement de chaleur illustre la structure et l'épaisseur de la flamme aluminium-air. On retrouve une épaisseur avoisinant 1,3 mm mais avec une évolution du taux non continue dans la flamme. Dans le front de la flamme, le taux est uniforme et atteint environ $2,8 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ car l'ensemble des mailles contient un nombre proche de particules suivies. Mais en avançant dans la flamme, la vitesse de la phase gazeuse augmente et le nombre de particules d'aluminium suivies par maille diminue. L'évaporation et la combustion des particules d'aluminium font que le taux de dégagement de chaleur atteint $4,5 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ dans certaines mailles. D'autres mailles ne contiennent aucune particule d'aluminium suivie et la combustion n'y a pas lieu. Mais, comme cela a été dit précédemment, augmenter le nombre de particules d'aluminium suivies par maille $N_{s,p}$ conduirait à des temps de calculs trop longs et ne changerait pas la phénoménologie.

Au niveau du pied de la flamme, des réactions de combustion ont lieu dans la zone où s'est échappée l'alumine gazeuse. Ces réactions permettent d'avoir un taux de dégagement de chaleur avoisinant $0,7 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$ près du pied de la flamme et qui diminue rapidement en s'éloignant de celui-ci. Ces réactions ont lieu grâce à la fuite d'oxydes d'aluminium, autres que l'alumine, qui réagissent progressivement avec l'oxygène de l'air à 300 K. Elles contribuent à la formation d'une quantité supplémentaire d'alumine gazeuse, ce qui conduit à l'augmentation de la taille des gouttes d'alumine dans cette zone.

Comme cela a été annoncé lors de l'analyse de la température de la phase gazeuse, la Fig. 6.22 met en avant le problème de résolution au niveau de l'oscillation du sommet de la flamme. Le taux de dégagement de chaleur atteint un maximum de $4,8 \text{ GW}\cdot\text{m}^{-3}$, ce qui provoque une forte montée en température dans cette zone. On pense que ce phénomène numérique peut être corrigé en modélisant la flamme entièrement et non seulement par moitié.

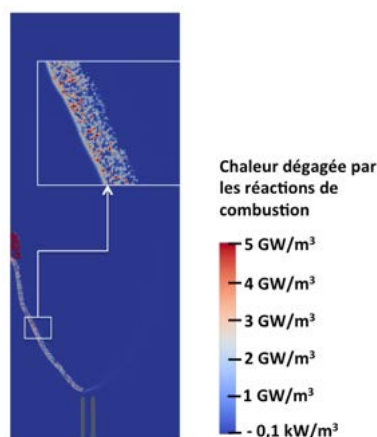


FIGURE 6.22 – Taux de dégagement de chaleur lié aux réactions de combustion en phase gazeuse dans la flamme 2D aluminium-air

6.4 Comparaison avec le cas expérimental

La modélisation de la flamme 2D a été faite en prenant comme référence la flamme de type « bec Bunsen » des travaux de R. LOMBA [66]. Cette section a comme objectif de comparer la flamme expérimentale de configuration axisymétrique avec la flamme numérique 2D plane obtenue avec AVBP. Pour cela, la structure et les caractéristiques des flammes seront comparées. Il a été vu que pour les cas numériques et expérimentaux, une déformation se déplace sur la flamme. Cette déformation sera aussi comparée pour les deux cas.

6.4.1 Structure et caractéristiques de la flamme

La Fig. 6.23 représente une tomographie de la flamme expérimentale aluminium-air (image a) et une visualisation de la flamme 2D numérique (image b). La deuxième visualisation est composée de deux représentations mises côte-à-côte pour représenter une flamme complète. La partie gauche représente l'évolution du diamètre des particules d'alumine et la partie de droite représente l'évolution de la température de la phase gazeuse dans le domaine au même instant.

La tomographie de la flamme expérimentale met en avant la présence de la phase dispersée dans la flamme. La phase provenant de l'injecteur est composée de particules d'aluminium et la phase dense située après la zone sombre, est composée de gouttes d'alumine. Ainsi la zone sombre est définie comme étant la flamme car le gaz est accéléré à travers la flamme et l'aluminium s'évapore. Cette structure de flamme se retrouve dans notre modélisation 2D. L'aluminium est injecté par l'injecteur principal avec l'air et s'évapore dans la flamme pour alimenter la combustion. À partir de la symétrie, on retrouve une flamme triangulaire dans le plan 2D, comme celle obtenue dans le plan laser. Une similitude peut être constatée au niveau du pied de la flamme. La flamme accélère et dévie l'écoulement qui était initialement vertical. Mais une différence est constatée sur l'angle de déviation qui est plus petit pour le cas expérimental que pour le cas numérique. Cette variation peut être en partie causée par la mise en place de la flamme guide méthane-air pour le cas expérimental. Cette flamme guide stabilise le pied de la flamme.

Les caractéristiques des flammes aluminium-air ont pu être mesurées comme la vitesse et la température de flamme pour les deux cas. Pour la flamme expérimentale, la température de flamme obtenue par l'analyse spectrale des raies émises par l'espèce AIO est estimée à 3146 K. Pour la flamme numérique, la température de flamme calculée avoisine 3365 K, soit une différence de 219 K avec le cas expérimental et de 10 K avec le cas 1D. La mesure de la vitesse de flamme expérimentale a été faite à partir de deux méthodes différentes, ce qui donne deux valeurs de vitesse de flamme qui sont de $28,2 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ et $32,1 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$. Pour la flamme numérique, la vitesse de flamme mesurée avoisine $34,6 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$, soit une vitesse supérieure respectivement de $6,4 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ à $2,5 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ par rapport au cas expérimental. Il est à noter que la vitesse de flamme mesurée pour le cas 2D est supérieure de $7,9 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ par rapport à celle mesurée pour le cas 1D.

L'épaisseur de flamme a également été déterminée expérimentalement et numériquement. Pour le cas expérimental, la mesure est réalisée à partir de la tomographie par plan laser de la flamme. L'épaisseur de la flamme est considérée égale à celle de la zone sombre qui représente la zone où ont lieu l'évaporation de l'aluminium et les réactions de combustion. Ainsi l'épaisseur de flamme est estimée à 1,2 mm. Pour le cas numérique, comme il a été défini dans les cas 1D du chapitre 5, l'épaisseur de la flamme peut prendre 2 formes. La première est l'épaisseur thermique de la flamme qui est définie grâce à la montée en température du gaz. La seconde est l'épaisseur particulaire de la flamme qui est définie grâce à l'évaporation des gouttes d'aluminium. Dans notre cas, ces épaisseurs sont similaires puisque les particules d'aluminium sont petites avec une forte conduction, ce qui permet à la température des particules d'être rapidement égale à la température du gaz. De même, l'énergie nécessaire pour la fusion de l'aluminium étant faible, le changement de phase se fait rapidement dans le front de flamme. Les épaisseurs sont alors proches et avoisinent 1,3 mm. Ainsi les épaisseurs de flamme mesurées pour le cas expérimental et numérique sont très proches.

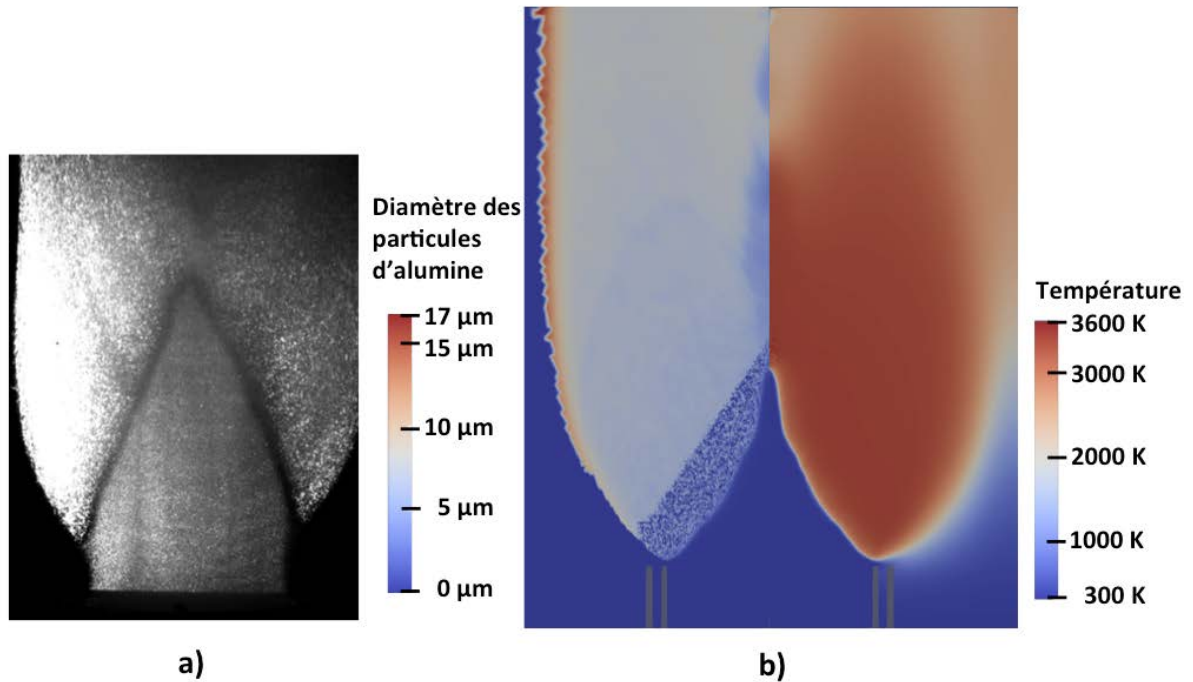


FIGURE 6.23 – Comparaison des flammes aluminium-air expérimentale et numérique. a) Tomographie de la flamme de type « bec Bunsen » des travaux de R. LOMBA [66]. b) Représentation de la flamme 2D aluminium-air entière avec l'évolution du diamètre des particules d'alumine à travers la flamme à gauche et l'évolution de la température de la phase gazeuse à travers la flamme à droite.

6.4.2 Déformation de la surface de la flamme

Dans les cas expérimentaux et numériques, des déformations apparaissent sur la structure de la flamme. La Fig. 6.24 représente le déplacement d'une déformation le long de la flamme vers le sommet de celle-ci. Ces deux images correspondent à deux solutions espacées dans le temps de 5 ms. En mesurant la position de la déformation à ces deux instants, la vitesse de déplacement de la déformation le long de la flamme peut être calculée et elle est estimée à $0,92 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. De même, cette vitesse est mesurée pour le cas expérimental et avoisine $1,07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Ces deux valeurs sont proches l'une de l'autre avec une différence de $0,15 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Cette faible différence pourrait s'expliquer par la variation de la vitesse d'injection V_{max} entre les cas expérimentaux et numériques.

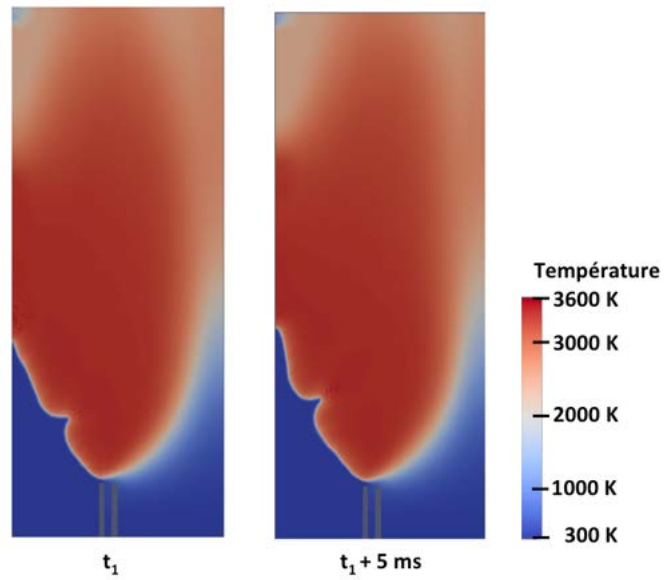


FIGURE 6.24 – Température de la phase gazeuse à 2 instants espacés de 5 ms

Pour le cas numérique, la déformation à la surface de la flamme se propage jusqu'à son sommet. Une fois le sommet atteint, celui va être étiré et rompre à sa base, ce qui conduit à la libération d'un petit nuage de particules froides d'aluminium. Une flamme se place alors autour de ce nuage et le brûlera dans un court intervalle de temps. Cette évolution se traduit par une oscillation du sommet de la flamme et est à l'origine de la forte température dans cette zone. La Fig. 6.25 illustre l'oscillation du sommet de la flamme à partir de différents instants de la simulation.

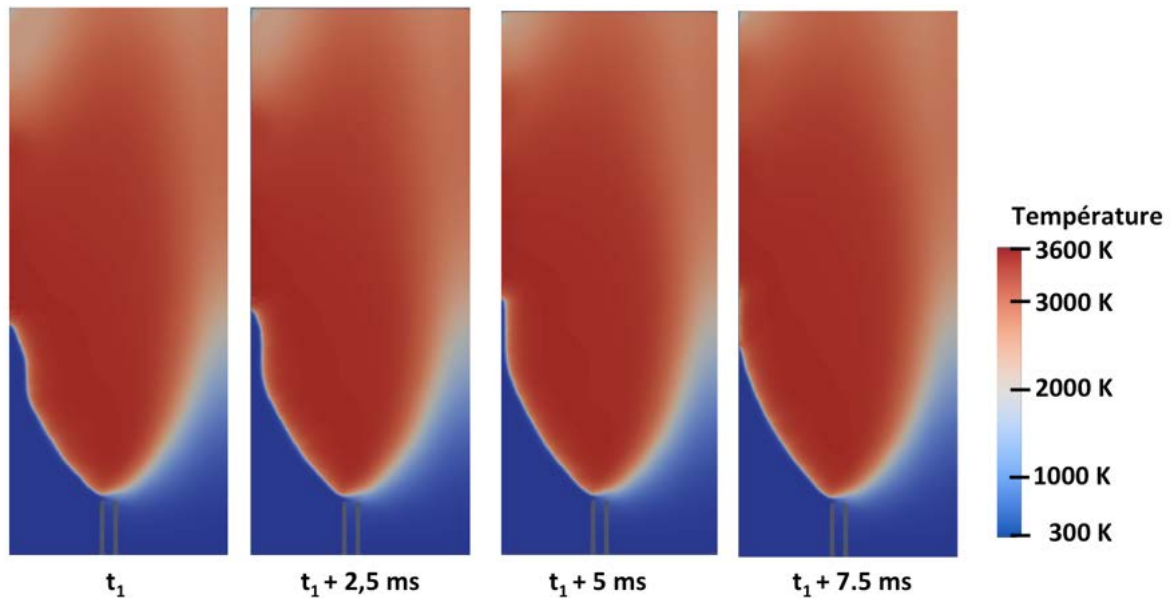


FIGURE 6.25 – Étirement du sommet de la flamme 2D à 4 instants espacés de 2,5 ms

6.5 Conclusion sur la modélisation de la flamme 2D aluminium-air

Les cas 1D nous ont permis de mesurer les caractéristiques de la flamme modélisée, comme la température, la vitesse et l'épaisseur de flamme. À partir de ces valeurs, une flamme 2D a pu être réalisée en prenant la configuration expérimentale des travaux de R. LOMBA [66] comme référence. Une modélisation 2D de la moitié de ce brûleur a été définie comme domaine de calcul.

Comme pour le cas 1D ou le cas expérimental, l'initialisation de la flamme doit suivre une démarche d'allumage longue et complexe. Cette démarche suit celle faite dans le cas 1D avec l'utilisation d'une espèce passive. Cette méthode permet d'allumer progressivement la flamme entre une zone contenant des particules d'aluminium et de l'air à basse température T_i et une zone contenant l'espèce passive à haute température. Mais cet allumage ne peut pas se faire avec une température T_i des gaz frais trop faible. Ainsi la méthode utilisée consiste à réduire progressivement la température T_i de 900 K à 300 K. Pour gagner du temps de calcul, cette initialisation, qui demande un grand nombre d'itérations, a été faite avec un maillage plus grossier et avec une flamme épaissie et ralentie. Une fois la structure de la flamme obtenue, le maillage initial et les propriétés de la flamme ont été rétablis. Mais cette dernière étape provoque de nombreuses déformations de la structure de la flamme. De la viscosité artificielle a été employée pour amortir ces déformations. Cette viscosité est retirée progressivement pour obtenir une flamme 2D aluminium-air stationnaire.

La flamme 2D obtenue est stœchiométrique, stationnaire avec une hauteur avoisinant 3,1 cm et une température initiale de l'air et des particules à 300 K. Des germes d'alumine nanométriques sont injectés avec les particules d'aluminium dont la taille initiale est de 7 μm . L'injection des germes d'alumine suit un rapport R_{germe} égal à 1, ce qui conduit à injecter un germe d'alumine pour une particule d'aluminium. Les évolutions de la phase gazeuse et de la phase dispersée sont proches de ce qui a été observé pour le cas 1D. L'aluminium initialement solide chauffe à l'approche de la flamme et change de phase. Lorsque l'aluminium est en phase liquide, il s'évapore, ce qui lui permet de réagir dans le front de flamme. Ces réactions fournissent des oxydes d'aluminium, dont de l'alumine gazeuse. L'aluminium s'évapore totalement à environ 1,2 cm derrière le front de flamme. Les germes d'alumine injectés avec l'aluminium vont chauffer et capter l'alumine gazeuse en lui permettant de se condenser et de se solidifier. Arrivée à sa température de fusion, l'alumine change de phase et passe en phase liquide. Ces gouttes d'alumine seront présentes dans les gaz brûlés et auront une taille moyenne de 6,8 μm . Leur taille est supérieure au niveau de l'interface entre les gaz brûlés et l'air à 300 K à cause d'une température plus faible qui favorise la production et la condensation de l'alumine gazeuse. Dans les gaz brûlés, l'alumine liquide est à haute température avec une surface d'échange suffisamment grande pour rayonner. Le rayonnement entraîne le refroidissement des gouttes ce qui provoque le refroidissement du gaz. Ainsi la phase gazeuse a une température de 3365 K dans la flamme et subit un refroidissement lorsqu'elle s'éloigne de celle-ci pour atteindre une température de 2370 K. Cette température est celle de la fusion de l'alumine qui change de phase dans cette zone.

La flamme modélisée a pu être comparée avec la flamme expérimentale obtenue dans les travaux de R. LOMBA [66]. Mis à part la différence sur la vitesse d'injection de l'air et des particules à cause de la différence fondamentale de géométrie, les flammes sont très similaires. Grâce à la tomographie par plan laser de la flamme expérimentale, la phase dispersée est visible et son évolution à travers la flamme est similaire à celle observée dans le cas numérique. Dans notre simulation, l'aluminium solide est présent dans l'air et des gouttes d'alumine sont présentes dans les gaz brûlés. Dans les deux cas, la flamme accélère et dévie l'écoulement du gaz. Cependant, l'écoulement diffère au niveau du pied de la flamme puisque celle-ci est stabilisée par une flamme pilote dans le cas expérimental alors que ce n'est pas le cas numériquement. Les mesures faites sur la vitesse de flamme et sur la température ont montré des résultats très proches avec des écarts entre les cas de 2,5 $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$ à 6,4 $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$ pour la vitesse de flamme selon la méthode de mesure utilisée, et de 216 K pour la température de flamme. Malgré une méthode de mesure différente de l'épaisseur de la flamme, cette valeur est de 1,2 mm pour le cas expérimental contre 1,3 mm pour le cas numérique. Ces résultats proches sont rassurants sur la qualité du modèle de combustion diphasique dans ces conditions. Un autre phénomène est observé dans les cas expérimental et numérique : la propagation d'une déformation le long de la flamme. Cette déformation a une structure proche pour les deux cas. Sa vitesse est de 1,07 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ pour le cas expérimental et 0,92 $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ pour le cas numérique. Malgré les inconnues concernant l'origine de ces déformations, il est

intéressant de constater leur apparition et leur similitude dans les deux cas.

La modélisation de la flamme 2D aluminium-air a montré de bons résultats lors de sa comparaison avec la flamme expérimentale du CNRS-ICARE. Mais des modifications peuvent être apportées pour améliorer la simulation et la rapprocher au mieux du cas expérimental. Premièrement, il serait intéressant d'y ajouter la flamme guide qui devrait stabiliser le pied de flamme. Les éléments géométriques et les conditions aux limites nécessaires pour modéliser cette flamme secondaire sont déjà présents dans le maillage puisque cette flamme devait être employée. Sa mise en place peut être celle qui a été prévue initialement et qui consistait à injecter les produits de combustion de la flamme méthane-air à la température de flamme et à une vitesse qui est celle de ses gaz brûlés. Cette méthode nous évite de modifier le schéma réactionnel du modèle et nous apporterait les effets de la flamme guide sur la flamme principale aluminium-air. Deuxièmement, la phase dispersée est injectée avec un écart de 2 mm par rapport à la paroi de l'injecteur principal. Cet écart était nécessaire pour éviter que la flamme ne remonte dans l'injecteur à cause du profil de la vitesse d'injection qui impose une vitesse nulle à la paroi. Mais si on veut se rapprocher au mieux des conditions expérimentales, il faut injecter les particules d'aluminium et les germes d'alumine sur toute la largeur de l'injecteur principal. Pour cela, il faudrait supprimer la couche limite sur la paroi de l'injecteur principal, ce qui empêcherait l'écoulement de ralentir en proche paroi et la flamme de rentrer dans l'injecteur principal. Ensuite, il serait intéressant de revenir sur le fait d'appliquer des conditions aux limites isothermes sur les parois de l'injecteur principal 300 K, tout en gardant la couche limite de l'écoulement. Elle conduirait au refroidissement des gaz en proche paroi et pourrait éteindre la flamme dans cette zone. On éviterait aussi la propagation de la flamme le long de l'injecteur principal. Troisièmement, une amélioration peut être apportée sur la résolution de la flamme. Pour cela, il faudrait diminuer le nombre $N_{v,p}$ et $N_{v,g}$ par un facteur 10, ce qui augmenterait le nombre $N_{s,*}$ de particules suivies par maille dans la flamme et empêcherait d'avoir des mailles vides de particules au niveau de la flamme. Ce raffinement permettrait d'obtenir une évolution du taux de dégagement de chaleur continue au sein de la flamme mais provoquerait une forte augmentation des temps de calcul. Dernièrement, le domaine de calcul doit être réajusté pour permettre de simuler la flamme complète. Cette modification pourrait corriger les sauts de taux de dégagement de chaleur présents au sommet de la flamme, mais augmenterait grandement le temps de calcul. Ainsi des calculs pourraient être envisagés en 2D, puis en 3D pour prendre en compte la véritable configuration d'injection.

Troisième partie

Participation de la combustion de l'aluminium lors de la post-combustion de charges explosives contenant un additif métallique

Chapitre 7

Étude de la dispersion de particules durant la post-combustion

La partie 2 était consacrée à l'étude de la combustion diphasique de l'aluminium avec l'air grâce à l'implémentation d'un modèle dans AVBP. Dans cette nouvelle partie, la combustion de l'aluminium est à nouveau étudiée, mais dans le contexte de la post-combustion de charges explosives contenant des particules d'aluminium. Le chapitre 2 a montré que l'aluminium est couramment utilisé dans la composition d'explosifs condensés car il a une excellente densité énergétique. Durant la phase de détonation qui est de l'ordre de quelques dizaines de microsecondes, les particules micrométriques d'aluminium n'ont pas le temps de s'évaporer, malgré les hautes températures du fait des hautes pressions atteintes grâce à l'onde de détonation. Néanmoins l'aluminium s'évapore et brûle durant la post-combustion, ce qui apporte de la chaleur aux produits de détonation et à l'air autour de la boule de feu. La présence de ces particules et leur combustion influence les caractéristiques de la post-combustion, que ce soit l'évolution de la boule de feu ou la propagation des ondes de choc.

Ce chapitre a pour objectif de caractériser la dispersion de particules d'aluminium inertes durant la post-combustion. Cette étude ne concerne que la dispersion des particules et ne prend en compte ni la combustion, ni les changements de phase de l'aluminium. La modélisation de la post-combustion en phase gazeuse est similaire à celle présente dans les travaux de thèse de S. COURTIAUD [25]. Ses travaux comprenaient des simulations de la post-combustion d'une charge explosive avec AVBP. Pour notre étude, la modélisation 2D de la post-combustion en phase gazeuse à partir d'un disque de gaz sous pression a été retravaillée pour y ajouter des particules inertes. Cette méthode de modélisation permet de considérer une pression et une température moins grande que celles rencontrées après une détonation. Des comparaisons sont faites dans la section 7.3. Malgré les différences sur l'état initial des produits de détonation, les phases caractérisant la post-combustion sont présentes et l'impact de la présence de particules d'aluminium pourra être évalué. L'étude comprend plusieurs cas dont un cas sans particule, proche de ce qui a été fait dans les travaux de S. COURTIAUD [25], puis des cas d'études sont faits avec des particules micrométriques d'une taille 10 μm ou 40 μm avec des distributions monodisperse et polydisperse.

7.1 Mise en place des simulations de post-combustion avec particules non réactives

7.1.1 Cas d'étude

La dispersion des particules d'aluminium inertes durant la post-combustion est étudiée grâce à quatre cas répertoriés dans le tableau 7.1. L'ensemble de ces cas utilise la même condition initiale qui est un disque à haute température et à haute pression avec un profil radial de vitesse orienté vers l'extérieur. Ces simulation sont faites avec le schéma convectif TTG4A présenté dans la section 3.2.4.1. Le premier cas est une post-combustion en phase gazeuse sans particule qui servira de référence pour évaluer l'impact de la présence des particules inertes sur les phases de la post-combustion.

Les cas 2 et 3 reprennent le cas 1, mais en y ajoutant des particules d'aluminium non réactives. La distribution de taille des particules est monodisperse pour ces 2 cas avec une taille de $10\ \mu\text{m}$ pour le cas 2 et de $40\ \mu\text{m}$ pour le cas 3. Le cas 4 est similaire aux cas précédents avec une distribution de taille polydisperse. Cette distribution a été définie dans la section 2.1.1.3 et suit une évolution log-normale avec un diamètre moyen géométrique d_G égal à $30\ \mu\text{m}$ et un diamètre de SAUTER d_{32} égal à $45\ \mu\text{m}$.

TABLE 7.1 – Ensemble des cas de post-combustion avec des particules d'aluminium inertes

Cas	Comb. des particules	d_p	Distribution
1	Non	-	-
2	Non	$10\ \mu\text{m}$	monodisperse
3	Non	$40\ \mu\text{m}$	monodisperse
4	Non	$[1-60]\ \mu\text{m}$	polydisperse

7.1.2 Domaine de calcul

Le domaine de calcul est 2D plan et a la forme d'un disque avec un diamètre de $2,5\ \text{m}$. Le maillage n'est pas uniforme dans tout le domaine et sa résolution augmente par étapes en se rapprochant du centre comme le montre la Fig. 7.1. Au centre, les mailles ont une taille avoisinant $0,5\ \text{mm}$ et sont uniformes dans un disque de diamètre égal à $0,25\ \text{m}$. La taille des mailles augmente de $0,5\ \text{mm}$ à $3,0\ \text{mm}$ en s'éloignant de $0,25\ \text{m}$ à $0,5\ \text{m}$ du centre du domaine. À une distance r supérieure à $0,5\ \text{m}$ du centre du domaine, la taille des mailles est constante et avoisine $3,0\ \text{mm}$. Ainsi le domaine contient environs $3,5$ millions de mailles. Ce maillage est établi à partir des études faites dans les travaux de S. COURTIAUD [25], dont une indépendance au maillage. Néanmoins le domaine a été retravaillé depuis ses travaux pour y ajouter la zone avec le maillage grossier de façon à agrandir le domaine et éviter que des particules ne sortent de celui-ci.

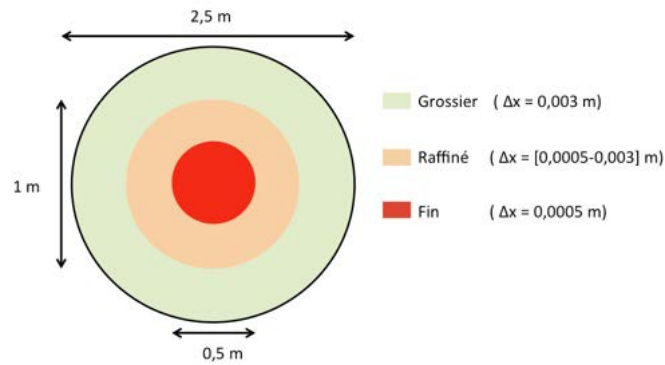


FIGURE 7.1 – Schéma du domaine de calcul pour la simulation de la post-combustion

7.1.3 Initialisation de la boule de feu

L'initialisation de la boule de feu devrait se faire dans les premiers instants qui suivent la fin de la détonation d'une charge sphérique. À cet instant, la boule de feu est constituée de produits de détonation à haute pression et haute température. La Fig. 7.2 représente les profils de température, de vitesse radiale et de pression 50 μ s après la fin de la détonation d'une charge explosive de B2213A d'une masse de 117 g calculés avec le code hydrodynamique 1D ALEXIA du CEA. Malheureusement ces profils initiaux atteignent des pressions et températures trop importantes accompagnées de gradients qui sont trop raides numériquement pour AVBP. Ainsi nos simulations initialisent la boule de feu avec des profils radiaux moins raides mais qui permettent de conserver les phénomènes physiques de la post-combustion.

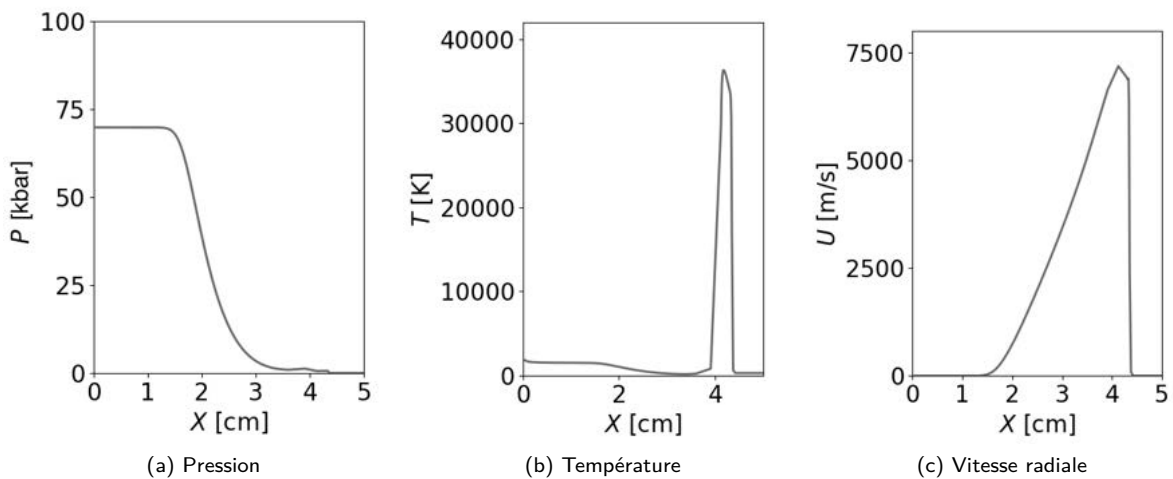


FIGURE 7.2 – Profils radiaux des propriétés des produits de détonation 50 μ s après la fin de la détonation d'une charge de 5,2 cm de diamètre de B2213A détonation

Les simulations 2D plan de post-combustion en phase gazeuse sont initialisées à partir d'un disque à haute température et à haute pression avec un profil de vitesse radiale non nul. Les profils radiaux de température, de vitesse et de pression à l'intérieur du disque sont obtenus en laissant se détendre le gaz sans particules, sous pression et à haute température contenu dans le disque sur une durée de 85 μ s. La Fig. 7.3 illustre l'évolution des profils radiaux du disque pressurisé jusqu'à l'obtention de notre condition initiale. Cette condition représente une solution hypothétique de fin de détonation d'une charge explosive condensée. Les températures et pressions

atteintes sont respectivement inférieures à 3000 K et 100 bar. Le disque contient les produits de détonation qui sont ceux obtenus après la détonation d'une charge explosive B2213A (explosif présenté dans le section 2.1.1.3). La composition des produits de détonation est établie grâce au code de thermochimie SIAME du CEA, ce qui donne : $Y_{CO_2} = 0,0117$, $Y_{CO} = 0,5998$, $Y_{H_2O} = 0,0298$ et $Y_{N_2} = 0,3587$. Le profil radial de vitesse non nul est une condition nécessaire pour étudier la dispersion des particules d'aluminium durant la post-combustion, puisque la vitesse initiale des particules est égale à celle de l'écoulement pour cette étude numérique.

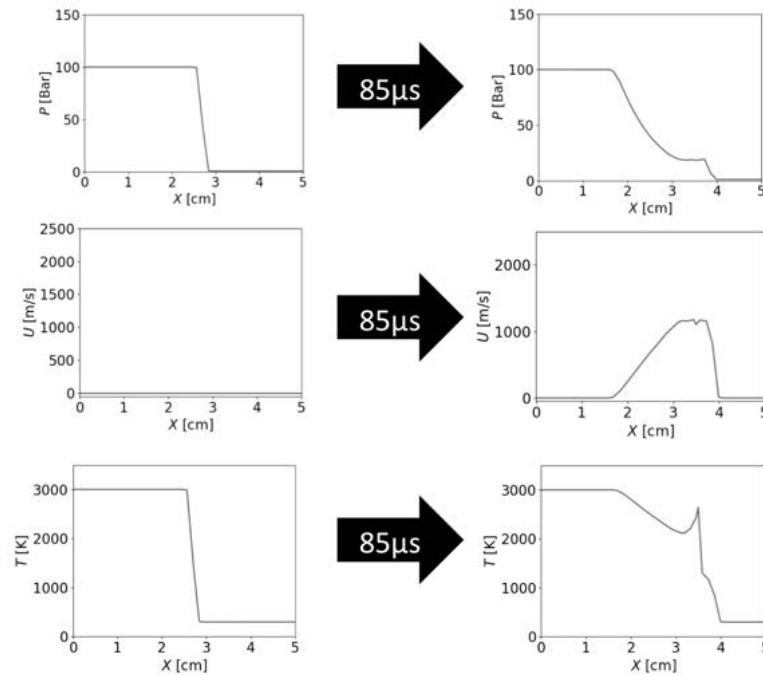


FIGURE 7.3 – Profils radiaux de pression, de température et de vitesse radiale dans le disque pressurisé

Les particules inertes d'aluminium sont initialement placées dans les produits de détonation, soit pour $r < 3,5$ cm. Le nombre réel N_p de particules initiales (soit $5,8 \cdot 10^8$ pour le cas 2, $8,9 \cdot 10^6$ pour le cas 3 et $1,9 \cdot 10^6$ pour le cas 4) est défini selon le cas en modifiant le nombre de particules virtuelles $N_{v,p}$ par particule suivie. Le nombre de particules suivies $N_{s,p}$ dans le domaine est égal à 10 000 dans tous les cas, ce qui augmente raisonnablement les temps de calcul et le temps de post-traitement par rapport au cas sans particules. Le nombre réel de particules est choisi pour avoir une masse d'aluminium égale à celle contenue dans une charge explosive en B2238A de 117 g avec 0,7 % de sa masse en aluminium, composition en aluminium différente de celle de la B2213A. Néanmoins cette masse de particules n'est pas un paramètre important dans cette étude puisque la combustion de l'aluminium et son évaporation ne sont pas prises en compte dans ce chapitre.

7.1.4 Modélisation de la combustion

Dans ce chapitre, l'évaporation et la combustion de l'aluminium ne sont pas prises en compte. Néanmoins des réactions de combustion en phase gazeuse entre l'air et les produits de détonation sont prises en compte. Les réactions de post-combustion qui ont lieu sont présentes dans le tableau 7.2. Elles regroupent les réactions d'oxydation du monoxyde de carbone et du méthane pour les cas d'explosifs à très fort déficit en oxygène. Ce schéma réactionnel est très simplifié par rapport à celui qui dirige la post-combustion des charges explosives condensées, mais il nous permet d'obtenir les principaux équilibres mis en jeu pendant la post-combustion.

TABLE 7.2 – Réactions de combustion entre les produits de détonation et l'air à l'interface de la boule de feu

N°	Réactions
1	$\text{CO} + 0,5 \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$
2	$\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O}$

Comme cela a été présenté dans la section 3.2.5, la modélisation de la post-combustion en phase gazeuse utilise un modèle d'épaississement de flamme. La flamme étant trop mince pour être résolue sur le maillage, l'épaississement constant d'un facteur 4,4 nous permet de la résoudre. Certaines propriétés de la phase gazeuse peuvent être influencées par ce modèle ce qui peut avoir des conséquences sur la phase dispersée. C'est le cas pour la traînée des particules qui diminue avec l'épaississement de la flamme dans l'ensemble du domaine de calcul. Cet effet sur la dynamique de la particule permet de positionner la particule dans la flamme tout en prenant en compte l'épaississement de celle-ci. Néanmoins notre étude ne porte pas un intérêt particulier pour l'interaction des particules avec la flamme de la boule de feu. Prférant privilégier l'interaction des particules avec le fluide dans l'ensemble du domaine, la modification appliquée sur la traînée des particules par le modèle d'épaississement est alors désactivée dans l'ensemble des cas.

7.2 Post-combustion sans particules : Cas 1

L'étude de la post-combustion est faite à partir de l'évolution du rayon de la boule de feu, de la zone de mélange et de la propagation des ondes de choc primaire et secondaire. Pour suivre ces différentes évolutions, le diagramme de marche est tracé en Fig. 7.4. Ce graphique permet de suivre la position des ondes de choc et l'épaisseur des zones de mélange et de réaction au cours du temps. Les limites de la zone de mélange sont définies comme étant les contours où la fraction massique des produits de détonation dépasse 0,85 et 0,15. La ligne en pointillé correspond au rayon où l'air et les produits de détonation sont en proportions égales. La zone de réaction est définie comme la plage de rayons où le taux de chaleur dégagée est supérieur ou égal à 15 % de son maximum. La ligne pleine correspond à la position du maximum du taux de dégagement de chaleur. Le diagramme obtenu est proche de ceux étudiés dans les travaux de S. COURTIAUD [25].

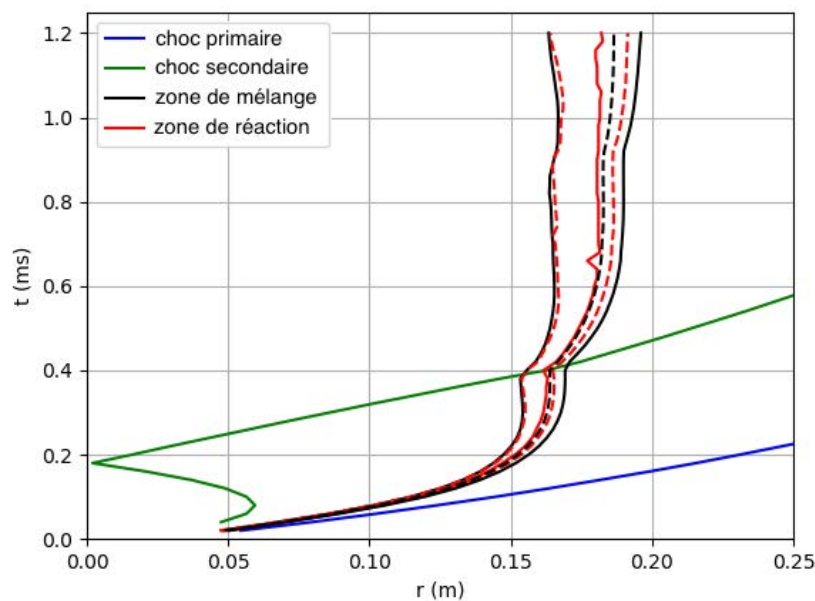


FIGURE 7.4 – Diagramme de marche de la post-combustion sans particules

Dans les premiers instants de la post-combustion, le rayon de la boule de feu augmente rapidement en passant de 3,4 cm à 10,3 cm en 0,08 ms. L'onde de choc primaire et la boule de feu voient leur rayon augmenter. Cependant, l'épaisseur de la zone de mélange reste faible. Le choc secondaire, qui est une onde de choc se situant à l'intérieur de la boule de feu à cet instant, se propage vers l'extérieur avec une vitesse qui diminue au cours du temps. Cette phase de la post-combustion est la phase d'expansion. La Fig. 7.5 illustre un extrait de la simulation de la post-combustion durant cette phase avec une vue globale et un zoom sur le quart supérieur droit de la boule de feu à l'instant $t=0,04$ ms. Sur cet extrait, la boule de feu a un rayon de 7,7 cm, soit 2,26 fois plus grand que le rayon initial. Les ondes de choc primaire et secondaire sont très proches de l'interface.

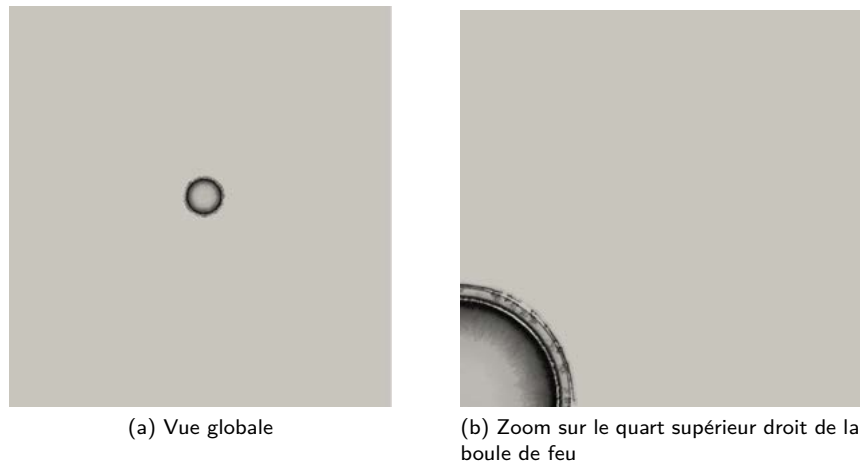


FIGURE 7.5 – Visualisation du gradient de densité obtenu par la simulation de la post-combustion durant la phase d'expansion ($t=0,04$ ms)

De 0,08 ms à 0,38 ms, la croissance de la boule de feu décélère et son rayon passe de 10,3 cm à 16,85 cm. Le choc secondaire se détache de l'interface interne de la boule de feu pour se diriger vers le centre de la boule de feu. À 0,18 ms, l'onde de choc s'y réfléchit et se propage vers l'extérieur de la boule de feu. Cette phase de la post-combustion est la phase d'implosion. La Fig. 7.6 illustre la post-combustion durant cette phase avec une vue globale et un zoom sur le quart supérieur droit de la boule de feu à l'instant $t=0,28$ ms. Sur cet extrait, la boule de feu a un rayon de 16,4 cm, soit 4,8 fois plus grand que son rayon initial. L'onde de choc primaire continue de s'éloigner de l'interface de la boule de feu, mais le choc secondaire vient de se réfléchir et se propage en direction de l'interface. La zone de mélange est plus épaisse que lors de la phase d'expansion avec une épaisseur avoisinante 1,2 cm. Cet épaississement est causé par le développement des instabilités à l'interface de la boule de feu.

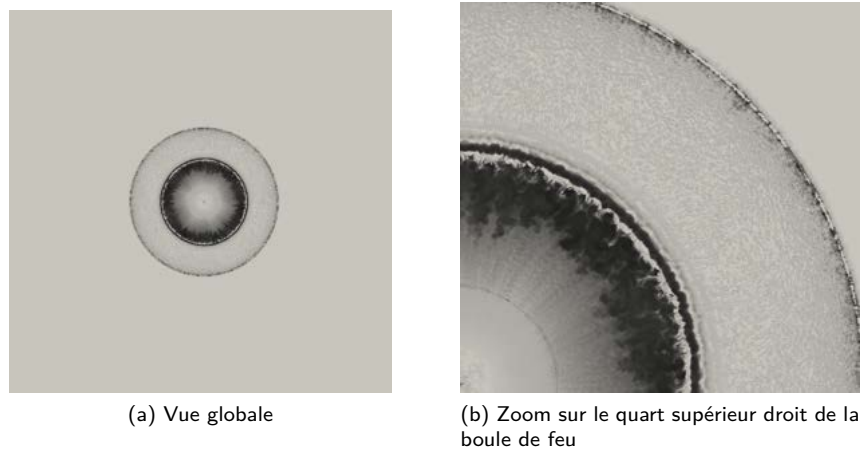


FIGURE 7.6 – Visualisation du gradient de densité obtenu par la simulation de la post-combustion durant la phase d'implosion ($t=0,28$ ms)

De 0,38 ms à 0,50 ms, l'onde de choc secondaire traverse la zone de mélange et provoque une nouvelle croissance de la boule de feu. Cette phase de la post-combustion est la phase de rechoc. La Fig. 7.7 illustre la simulation de la post-combustion durant cette phase avec une vue globale et un zoom sur le quart supérieur droit de la boule de feu à l'instant $t=0,46$ ms. Sur cet extrait, le choc secondaire vient de traverser la zone de mélange et contribue au développement d'autres instabilités. Ces instabilités brassent le mélange et augmentent le taux de dégagement de chaleur des réactions de combustion. L'épaisseur de la zone de mélange augmente grâce au développement des instabilités.

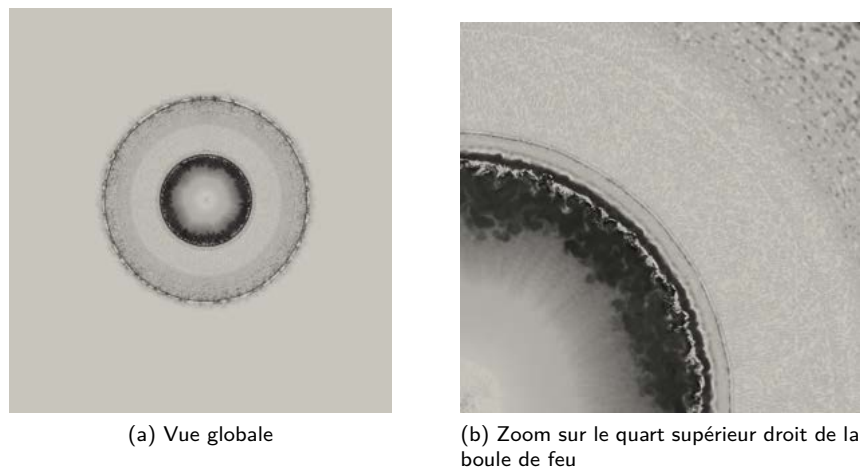


FIGURE 7.7 – Visualisation du gradient de densité obtenu par la simulation de la post-combustion durant la phase de rechoc ($t=0,46$ ms)

De 0,50 ms à 1,25 ms, le rayon de la boule de feu n'évolue plus significativement, sauf à $t=9,25$ ms avec une légère augmentation causée par le passage d'une faible onde de choc tertiaire. L'épaisseur de la zone de mélange continue d'augmenter lentement. Cette phase de la post-combustion est la phase de mélange asymptotique. La Fig. 7.8 illustre la simulation de la post-combustion durant cette phase avec une vue globale et un zoom sur le quart supérieur droit de la boule de feu à l'instant $t=1,0$ ms. Sur cet extrait, des larges instabilités sont présentes ce qui conduit la zone de mélange à atteindre une épaisseur importante qui avoisine 2,5 cm. Comme pour le choc primaire, le choc secondaire s'éloigne progressivement de la boule de feu avec une vitesse qui se réduit au cours de sa propagation.

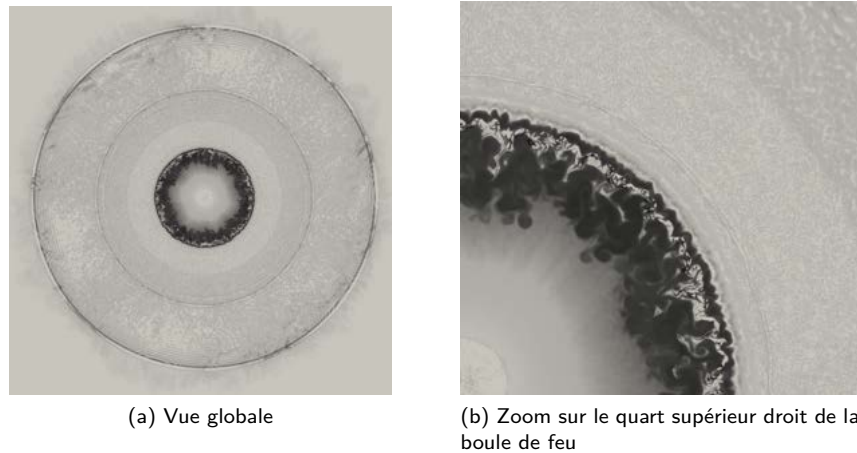


FIGURE 7.8 – Visualisation du gradient de densité obtenu par la simulation de la post-combustion durant la phase de mélange asymptotique ($t=1,0$ ms)

Les phases observées caractérisent le phénomène de post-combustion. La propagation des ondes de choc et l'évolution de la boule de feu sont des phénomènes similaires à ceux observés lors de la post-combustion de charge explosive sphérique.

7.3 Post-combustion avec des particules inertes : Cas 2

Dans le cas 1, le phénomène de post-combustion a été simulé pour une boule de feu à haute température et haute pression dont le rayon avoisine 3,5 cm. Ce cas est repris en y ajoutant un nuage de particules d'aluminium inertes, dont la distribution de taille est monodisperse et égale à $10 \mu\text{m}$. La vitesse initiale des particules est définie comme étant égale à celle du gaz, ce qui conduit à imposer une vitesse initiale aux particules qui dépend de leur position initiale dans la boule de feu.

Cette étude ne prend pas en compte la combustion de l'aluminium et se concentre essentiellement sur la dispersion des particules durant la post-combustion. Une analyse est faite sur le diagramme de marche et des suivis temporels de l'état de quelques particules selon leur localisation initiale.

7.3.1 Diagramme de marche avec la dispersion des particules

Le diagramme de marche de la post-combustion est tracé en Fig. 7.9 pour suivre l'évolution de la croissance de la boule de feu, de l'épaississement de la zone de mélange et de la propagation des ondes de choc. Pour suivre la dispersion des particules d'aluminium inertes durant la post-combustion, des isocontours sont ajoutés pour représenter la répartition de la masse de l'aluminium au cours du temps. À partir du centre de la boule de feu, le premier isocontour indique que 10 % de la masse d'aluminium est contenue entre le centre et cette limite. Chaque nouvel isocontour représente ensuite 10 % de masse d'aluminium en plus par rapport au précédent. Ainsi ces 10 isocontours nous permettent de suivre la dispersion de la masse d'aluminium au cours du temps.

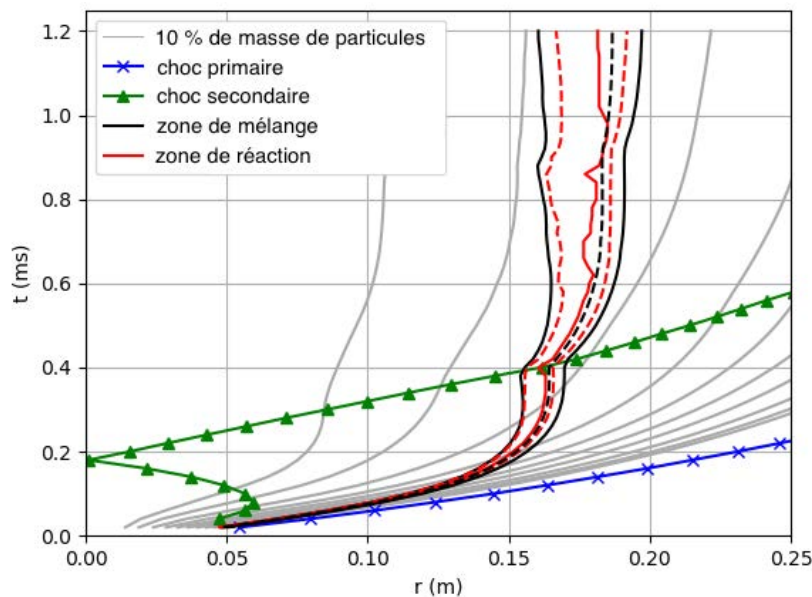


FIGURE 7.9 – Diagramme de marche de la post-combustion avec des particules inertes d'une taille de $10\ \mu\text{m}$

Dans les premiers instants de la post-combustion, l'inertie des particules et l'expansion des produits de détonation conduisent à entraîner les particules vers l'extérieur de la boule de feu. À la fin de l'expansion, plus de 20 % de l'aluminium est encore présent dans la boule de feu, mais la décélération de la boule de feu va réduire rapidement ce quota. De 0,08 ms à 0,38 ms, une grande quantité de particules traverse la zone de mélange et se retrouve en contact avec l'air. La Fig. 7.10 illustre un extrait de la simulation de la post-combustion avec les particules d'aluminium inertes de taille $10\ \mu\text{m}$ lors de la phase d'implosion, à 0,28 ms. À cet instant, 30 % de la masse totale d'aluminium est présente dans les produits de détonation, 5 % dans la zone de mélange et 65 % dans l'air. Le passage des particules à travers la zone de mélange conduit à la formation d'instabilités supplémentaires. À partir de cet instant, les particules à l'intérieur et à l'extérieur de la boule de feu évoluent différemment. Les particules dans l'air continuent à s'éloigner de la boule de feu en décélérant à cause de la traînée. Pour les particules présentes dans la boule de feu, leur inertie étant faible, leur dynamique est rapidement dominée par l'écoulement au sein de la boule de feu. Ainsi le passage du choc secondaire entraîne le reste des particules et les disperse une nouvelle fois vers l'extérieur. À la phase de mélange asymptotique, 21 % de la masse totale d'aluminium est présente dans les produits de détonation, 6 % dans la zone de mélange et 73 % dans l'air.

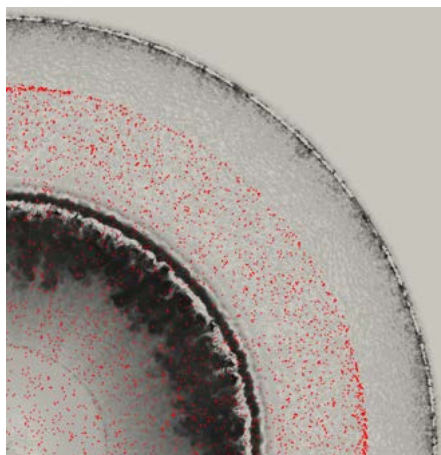


FIGURE 7.10 – Extrait de la simulation de la post-combustion avec des particules d'aluminium inertes de taille $10\ \mu\text{m}$ lors de la phase d'implosion ($t=0,28\ \text{ms}$)

Dans son ensemble, le diagramme de marche de la post-combustion avec des particules est très similaire avec celui de la post-combustion sans particules (Cas 1). Les ondes de choc primaire et secondaire se propagent à la même vitesse et sont peu influencées par la présence des particules d'aluminium inertes. Néanmoins, un léger épaissement de la zone de mélange peut être constaté pour le cas 2. Cet épaissement semble avoir lieu tout au long de la post-combustion grâce à la traversée des particules inertes dans la zone de mélange. À $t=1,2\ \text{ms}$, après le passage de 79 % de la masse totale d'aluminium, la zone de mélange s'épaissit de 5 mm, soit une augmentation de 15 % par rapport au cas 1.

7.3.2 Suivi temporel de la vitesse des particules

L'analyse du diagramme de marche a montré que la dispersion des particules d'aluminium dépend de leur position initiale. Les évolutions de la vitesse des particules et du nombre de REYNOLDS particulaire au cours du temps selon leur position initiale sont analysées dans cette section.

La Fig. 7.11 représente l'évolution de la vitesse des particules au cours du temps selon leur position initiale dans la boule de feu. Pour l'ensemble des courbes, la vitesse des particules diminue rapidement. Les particules initialement positionnées à plus de 25 mm du centre du disque ont une vitesse initiale élevée allant de $800\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ à $1180\ \text{m}\cdot\text{s}^{-1}$. Cette vitesse initiale permet aux particules de rester proches de l'onde de choc primaire et d'avoir une vitesse qui diminue progressivement avec la propagation de l'onde. Pour les particules localisées vers le centre de la boule de feu, leur vitesse initiale est faible et leur vitesse augmente avec l'expansion de la boule de feu. La dynamique des particules est dominée par l'écoulement, ce qui conduit à une diminution importante de la vitesse lorsque l'onde de choc secondaire se dirige vers le centre de la boule de feu. Ainsi plus les particules sont excentrées, plus vite elles subissent l'effet du premier passage du choc secondaire. Lors du second passage de l'onde de choc secondaire sur les particules, leur vitesse augmente. Pendant la phase de mélange asymptotique, l'ensemble des vitesses reste faible et tend progressivement vers une valeur nulle.

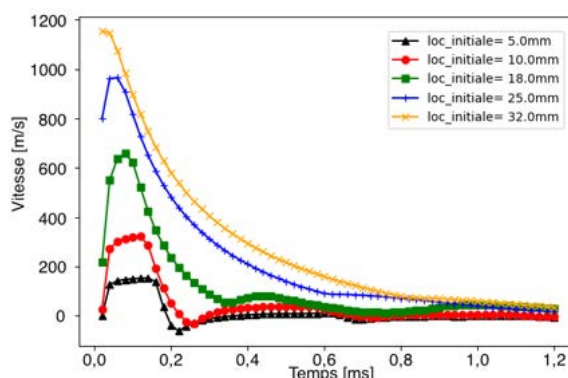


FIGURE 7.11 – Vitesse des particules d'aluminium inertes selon leur localisation initiale dans la boule de feu

Le suivi de la vitesse des particules au cours du temps et de l'état du gaz environnant permet de mesurer l'évolution du nombre de REYNOLDS particulaire au cours du temps. La Fig. 7.12 représente son évolution selon la position initiale de la particule dans la boule de feu. De grands nombres de REYNOLDS sont atteints dans les premiers instants pour l'ensemble des particules. Pour les particules situées initialement à plus de 25 mm du centre, leur vitesse initiale n'est pas nulle et une augmentation du nombre de REYNOLDS a lieu dans les premiers instants. L'origine de cette augmentation est la différence de vitesse entre les particules avec une grande vitesse initiale, comme l'a illustré le profil radial de vitesse initial de la boule de feu de la section 7.1.3, et le gaz dont la vitesse diminue lors de la phase d'expansion. Cet écart de vitesse provoque alors une augmentation du nombre de REYNOLDS qui atteint une valeur de 200 pour les particules initialement à 32 mm du centre. Par la suite, les vitesses des phases s'équilibrent rapidement et le gaz décélère au cours du temps, ce qui diminue le nombre de REYNOLDS à 25. Pour les particules situées initialement à moins de 18 mm du centre, leur vitesse initiale est nulle et l'expansion de la boule de feu provoque un fort écart de vitesse dans les premiers instants. Le nombre de REYNOLDS monte rapidement à 280 pour les particules initialement à 18 mm. La dynamique des particules étant dominée par l'écoulement qui décélère rapidement, la vitesse des particules évolue très vite avec celle de l'écoulement, ce qui conduit à avoir une valeur du nombre de REYNOLDS qui reste faible au cours du temps. Pour la majorité du temps de simulation, les particules ont un nombre de REYNOLDS faible.

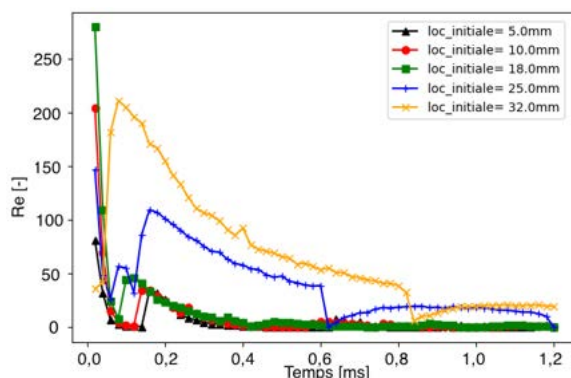


FIGURE 7.12 – Nombre de REYNOLDS des particules d'aluminium inertes selon leur localisation initiale dans la boule de feu

7.4 Post-combustion avec des particules d'aluminium de dimensions variables : Cas 3 et 4

Pour le cas 2, l'étude a montré que les particules de petites tailles se dispersent durant la post-combustion grâce à leur vitesse initiale, mais la dynamique des particules est rapidement dominée par l'écoulement. Une partie des particules est alors entraînée avec la propagation de l'onde de choc primaire à l'extérieur de la boule de feu, soit dans l'air environnant et une autre partie reste dans la boule de feu avec les produits de détonation. Dans ces nouveaux cas, la taille des particules est modifiée pour évaluer son influence sur leur dispersion durant la post-combustion. Le cas 3 traitera des grosses particules d'une taille de $40\ \mu\text{m}$. Le cas 4 traitera un nuage de particules avec une distribution de taille polydisperse dont le diamètre moyen est de $30\ \mu\text{m}$.

7.4.1 Grosses particules : Cas 3

Ce cas est similaire au cas 2 en utilisant des particules d'aluminium inertes puisqu'ils utilisent la même condition initiale de boule de feu et la même masse d'aluminium. Les différences sont la taille des particules qui est ici plus grande et vaut $40\ \mu\text{m}$ et le nombre total de particules qui est réduit à $8,9 \cdot 10^6$ pour garder la même masse d'aluminium. Ces particules sont uniformément réparties dans la boule de feu. À partir de cette condition initiale, la post-combustion contenant des grosses particules peut être étudiée avec un diagramme de marche.

La Fig. 7.13 représente le diagramme de marche de la post-combustion avec des particules d'aluminium inertes d'une taille de $40\ \mu\text{m}$. Dans les premiers instants, les particules proches de l'extérieur de la boule de feu se dispersent avec la propagation de l'onde de choc primaire. Pour les particules localisées initialement proches du centre, leur vitesse initiale est très faible et la mise en mouvement par l'écoulement est plus difficile que pour les petites particules du cas 2. Les particules du cas 3 ont une dynamique qui est dominée par leur vitesse initiale et ont un comportement balistique. Ainsi pour les particules proches du centre de la boule de feu, la mise en mouvement des particules est causée par l'expansion des produits de détonation. Elles gardent cette inertie tout au long de la post-combustion sans être perturbées par l'écoulement au sein de la boule de feu et les passages de l'onde de choc secondaire. Les particules avec une vitesse initiale élevée restent proches de l'onde de choc primaire et certaines d'entre elles la dépasse lors de la décélération de l'onde. La Fig. 7.14 illustre la simulation de la post-combustion avec les particules d'aluminium inertes d'une taille de $40\ \mu\text{m}$ lors de la phase d'implosion, à $0,28\ \text{ms}$. À cet instant, des particules d'aluminium sont présentes dans les produits de détonation, la zone de mélange, l'air derrière et devant le choc primaire avec la formation d'un sillage derrière ces dernières. Les particules dans la zone de mélange interagissent avec les instabilités, ce qui peut les accroître et augmenter légèrement le mélange. La masse d'aluminium est alors répartie de la manière suivante : 35 % se situent dans les produits de détonation, 3 % dans la zone de mélange et 62 % dans l'air. Il y a environ 5 % de la masse d'aluminium en plus dans la boule de feu que pour le cas 2. Contrairement au cas 2, l'inertie des particules continue à faire sortir les particules de la boule de feu tout au long de la post-combustion. Lors de la phase de mélange asymptotique, à $t=1,2\ \text{ms}$, 18 % de la masse totale d'aluminium est présente dans les produits de détonation et 82 % dans l'air.

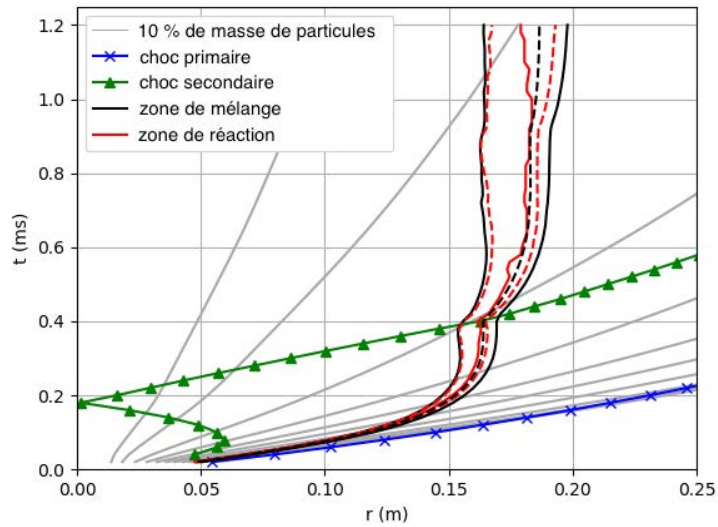


FIGURE 7.13 – Diagramme de marche de la post-combustion avec des particules inertes d'une taille de 40 µm

Dans son ensemble, le diagramme de marche de la post-combustion avec des particules est très similaire à celui de la post-combustion sans particule (Cas 1). Les ondes de choc primaire et secondaire se propagent à la même vitesse et sont peu influencées par la présence des particules d'aluminium inertes. De même, l'épaississement de la zone de mélange est similaire à celui constaté pour la post-combustion avec des particules d'une taille de 10 µm (Cas 2). Le comportement balistique des particules augmente le nombre de REYNOLDS particulaire. Cette augmentation est principalement constatée sur les particules dépassant l'onde de choc primaire, ce qui conduit à un nombre de REYNOLDS avoisinant 2000 comme le montre la Fig. 7.15. Sur l'ensemble des courbes de cette figure, le nombre de REYNOLDS reste faible pour l'ensemble des particules avec une valeur inférieure à 1000 tout au long de la post-combustion.

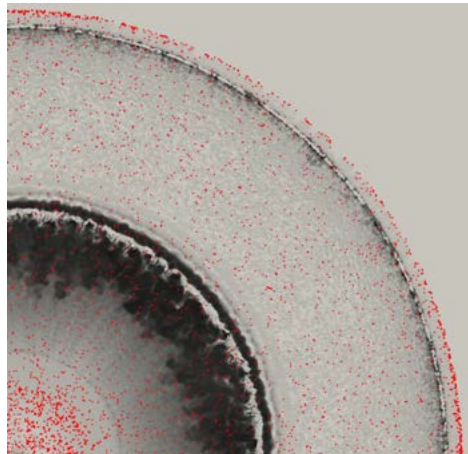


FIGURE 7.14 – Extrait de la simulation de la post-combustion avec particules d'aluminium inertes de taille 40 µm lors de la phase d'implosion ($t=0,28$ ms)

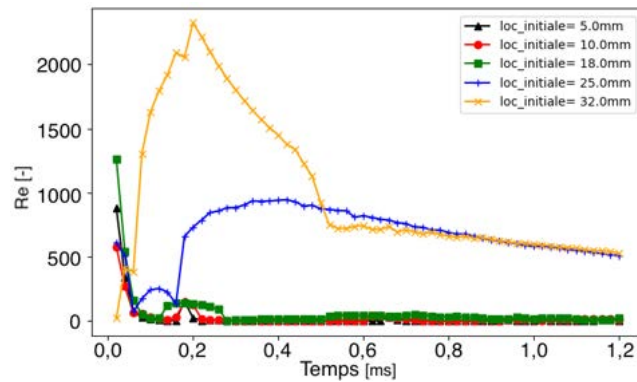


FIGURE 7.15 – Nombre de REYNOLDS des particules d'aluminium inertes selon leur localisation initiale dans la boule de feu

7.4.2 Distribution de taille polydisperse : Cas 4

Pour ce cas d'étude, les particules d'aluminium initialement placées dans la boule de feu ont un diamètre qui suit une loi de distribution log-normale. Elle est illustrée en Fig. 7.16 et est caractérisée par un diamètre moyen de $30\ \mu\text{m}$ et un diamètre de SAUTER de $45\ \mu\text{m}$. Cette distribution de taille de particules a été présentée dans la section 2.1.1.3. La masse d'aluminium introduite dans la boule de feu est la même que pour les cas 2 et 3, ce qui donne un nombre total de particules avoisinant $2 \cdot 10^6$. Ces particules ont un diamètre qui varie entre $1\ \mu\text{m}$ à $70\ \mu\text{m}$. Cette distribution de taille de particules a été choisie car elle est proche de ce qu'on peut trouver dans les charges explosives condensées contenant des particules d'aluminium. À partir de cette condition initiale, la post-combustion peut être étudiée avec le diagramme de marche.

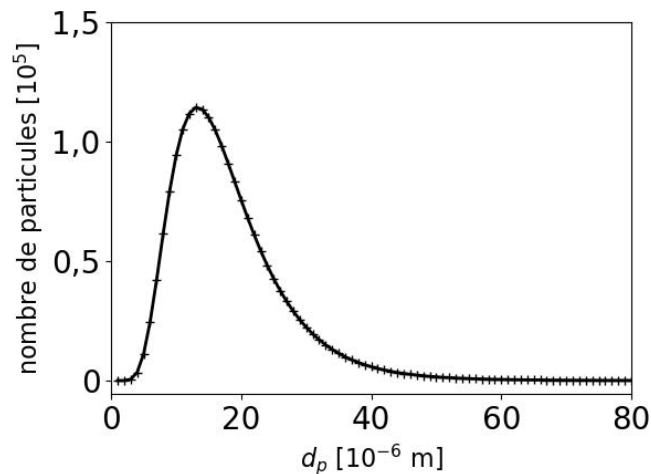


FIGURE 7.16 – Distribution du diamètre des particules d'aluminium

La Fig. 7.17 représente le diagramme de marche de la post-combustion avec des particules d'aluminium inertes de plusieurs tailles. Ce graphique est très proche de celui présenté pour la post-combustion avec des grosses particules (Cas 3), que se soit pour l'évolution de la boule de feu, la propagation des ondes de choc et la dispersion des particules. Pour la dispersion des particules, les isocontours localisent la répartition de la masse d'aluminium dans la boule de feu et à l'extérieur de celle-ci. Or la répartition de la masse de l'aluminium est

majoritairement liée à la position des grosses particules et leur dispersion est essentiellement dominée par leur vitesse initiale. La Fig. 7.18 illustre la simulation de la post-combustion avec des particules d'aluminium inertes de plusieurs tailles. lors de la phase d'implosion, soit à 0,28 ms. Cet extrait représente la position des petites et grosses particules initialement placées avec les produits de détonation. Au niveau du centre de la boule de feu se trouvent les grosses particules qui avaient une vitesse nulle initialement. Ces particules sont difficilement entraînées par l'expansion des gaz, contrairement aux petites particules. Au niveau de la zone de mélange et dans l'air derrière le choc primaire se trouve un mélange de petites et de grosses particules. Comme pour le cas 3, des particules dépassent l'onde de choc primaire lors de sa décélération. Les particules d'aluminium se trouvant le plus à l'avant de l'onde de choc sont les plus grosses. Ces particules ont un comportement balistique grâce à leur vitesse initiale et leur dynamique n'est que peu influencée par l'environnement. Un sillage est aussi formé à l'arrière des grosses particules se déplaçant dans l'air au repos. La sortie des particules de la boule de feu et le dépassement de l'onde de choc ont déjà été constatés expérimentalement avec une caméra rapide.

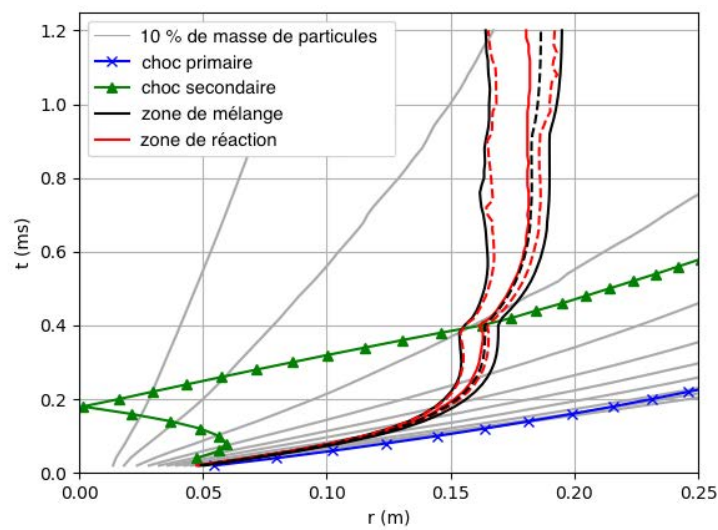


FIGURE 7.17 – Diagramme de marche de la post-combustion avec des particules inertes respectant une loi de distribution de taille log-normale

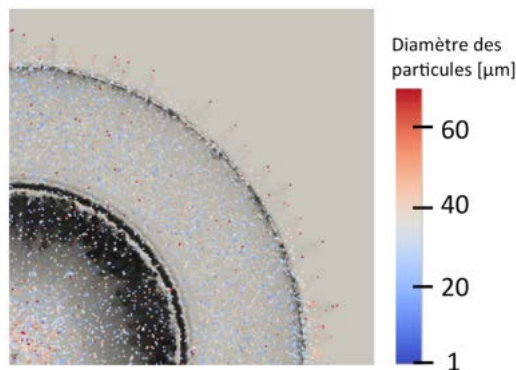


FIGURE 7.18 – Extrait de la simulation de la post-combustion avec particules d'aluminium inertes de plusieurs tailles lors de la phase d'implosion ($t=0,28$ ms)

7.5 Conclusion sur la dispersion des particules durant la post-combustion

La post-combustion est un phénomène difficile à modéliser numériquement à cause de sa rapidité et de son intensité. L'une des méthodes est d'initialiser la simulation à partir de profils obtenus après la détonation d'une charge. Des profils ont pu être calculés à partir du code ALEXIA du CEA, mais les gradients des grandeurs physiques sont trop raides et les profils atteignent des valeurs trop grandes pour être utilisées dans AVBP. Le choix a alors été fait d'utiliser une condition initiale représentant une boule de feu à haute pression et haute température avec un profil radial de vitesse non nul. Cette condition initiale représente un explosif hypothétique avec des températures et pressions plus faibles que celles de la condition réelle de l'explosif, de même pour les gradients qui sont moins raides numériquement. À partir de cette condition, la post-combustion en phase gazeuse a pu être simulée. Dans cette simulation, les différentes phases caractéristiques de la post-combustion ont pu être observées, telles que les phases d'expansion, d'implosion, de rechoc et de mélange asymptotique. Durant ces phases, les ondes de choc primaire et secondaire ont pu être suivies et l'interaction entre le choc secondaire et la zone de mélange a pu être constatée. La croissance de la boule de feu et l'épaississement de sa zone de mélange ont pu être mesurés.

Après avoir étudié le cas de post-combustion sans particules, ce dernier est repris en y ajoutant initialement des particules. L'ajout des particules au sein de la boule de feu est fait en supposant que le gaz et les particules sont en équilibre de vitesse au début de la post-combustion. La vitesse initiale des particules dépend alors de leurs positions. Différents cas de post-combustion avec des particules ont été réalisés en faisant varier la taille des particules. Le cas 2 avait des particules d'une taille de $10\ \mu\text{m}$, le cas 3 avait des particules d'une taille de $40\ \mu\text{m}$ et le cas 4 avait des particules avec une distribution de taille de particules polydisperse allant de $1\ \mu\text{m}$ à $70\ \mu\text{m}$. La dispersion des particules d'aluminium pour ces différents cas a montré que la taille des particules a une influence. Les petites particules sont rapidement entraînées par l'écoulement, malgré leur vitesse initiale. Ainsi les petites particules ont tendance à se disperser dans l'ensemble de la boule de feu et à l'extérieur de celle-ci. Les grosses particules ont un comportement balistique très dépendant de leur vitesse initiale, donc de leur position initiale dans la boule de feu. Ainsi la dispersion des particules sera localisée majoritairement proche du centre de la boule de feu et du choc primaire selon leur localisation initiale. Les particules les plus éloignées initialement du centre de la boule de feu dépassent l'onde de choc primaire lors de leur décélération. Pour le cas 4 qui utilise des particules dont la taille sont une loi de distribution, la dispersion des particules se fait en fonction de la taille de celles-ci. Les particules considérées comme petites seront dispersées de façon presque homogène dans la boule de feu et l'air, alors que les grosses particules seront localisées près du centre de la boule de feu et près de l'onde de choc primaire. Des très grosses particules peuvent distancer l'onde de choc lors de sa décélération qui a lieu dans la phase d'implosion, ce qui a déjà été constaté expérimentalement à Gramat.

Chapitre 8

Post-combustion avec des particules d'aluminium réactives

Dans le chapitre 7, l'étude réalisée a porté sur la dispersion des particules durant la post-combustion. La dispersion était différente selon leur taille et leur localisation dans la condition initiale. Le passage de certaines particules au travers de la zone de mélange conduit à son épaissement et peut y amplifier la combustion. Cette interaction était uniquement due à la présence physique des particules et ne prenait pas en compte la combustion de l'aluminium avec son environnement. Dans ce nouveau chapitre, la combustion de l'aluminium est ajoutée au modèle. La combustion ne pourra pas être simulée avec le modèle mis en place dans la partie 2 de ces travaux. Lors de la post-combustion, les particules d'aluminium sont dispersées et brûlent à travers une flamme entourant chaque particule, soit une combustion de particules isolées. Pour une première approche, la combustion de l'aluminium ne suit pas le modèle mis en place dans la partie précédente. Ce modèle est difficile à appliquer dans ce contexte puisque la dispersion des particules est dépendante de leur taille, ce qui n'assure pas d'avoir une particule d'aluminium micrométrique et un germe d'alumine nanométrique dans une même maille. Par ailleurs, le maillage doit être plus fin que celui utilisé dans le chapitre 7 pour accueillir la combustion de l'aluminium en phase gazeuse, ce qui augmente grandement le temps de calcul. Ainsi ces difficultés nous ont conduits à utiliser un modèle plus simple mis en place dans une autre étude. Le modèle choisi est celui utilisé dans les travaux de L. LACASSAGNE [61] pour simuler la combustion de l'aluminium dans les moteurs à propergol solide. Ce cas s'approche de celui de la post-combustion d'une charge explosive condensée. Le modèle va pouvoir simuler simplement la combustion des particules d'aluminium en les considérant comme des sources de chaleur qui deviennent des résidus d'alumine en fin de combustion. Ce transfert de chaleur aura une influence sur le diagramme de marche de la post-combustion. Ces travaux ont été faits en fin de thèse et le manque de temps m'a empêché de perfectionner l'étude. Il faut alors voir cette étude comme une ouverture sur la modélisation de la post-combustion avec des particules réactives.

8.1 Présentation du modèle de combustion isolée

8.1.1 Description

Le modèle de combustion d'une particule isolée n'utilise pas de schéma réactionnel et se base sur le modèle d'évaporation de SPALDING [77]. La combustion de l'aluminium est alors limitée par l'évaporation et libère progressivement dans la phase gazeuse une quantité de chaleur correspondant à celle de la réaction globale de formation de l'alumine liquide à partir de l'aluminium gazeux et de l'oxygène de l'air. Cette chaleur avoisine $9,53 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ [61] et est constante quel que soit l'environnement qui entoure la particule. La combustion de l'aluminium est pilotée par la thermique dans ce modèle et n'influence pas la composition du gaz. La Fig. 8.1 est une illustration présentant les principales étapes du modèle de combustion. La particule d'aluminium solide est chauffée par son environnement à haute température jusqu'à atteindre sa température de fusion. La fusion a alors lieu et l'énergie s'accumule dans la particule pour lui permettre de fondre. Une fois en phase liquide, la goutte d'aluminium continue à chauffer et brûle progressivement en s'évaporant. Dans ce modèle, l'évaporation

ne transfère pas de masse d'aluminium à la phase gazeuse. Une perte de masse non conservative a lieu dans la phase liquide et un apport de chaleur, qui est celle de la combustion de l'aluminium, est fait vers la phase gazeuse. Néanmoins l'énergie nécessaire pour l'évaporation est prélevée à la phase gazeuse. Le diamètre de l'aluminium régresse progressivement en suivant le modèle d'évaporation de SPALDING. Lorsque la taille de la particule d'aluminium atteint la taille du résidu d'alumine, la particule d'aluminium est convertie en alumine sans changer de taille. La taille du résidu d'alumine est un paramètre constant et défini préalablement. Ce modèle de combustion de particules isolées simule la combustion de l'aluminium et la présence du résidu d'alumine en fin de combustion. Le rayonnement de l'alumine chaude n'est pas pris en compte dans cette étude et son absence n'a aucune influence sur la solution puisque les temps caractéristiques de la post-combustion sont de l'ordre de la milliseconde et les températures mises en jeu inférieures à 3000 K.

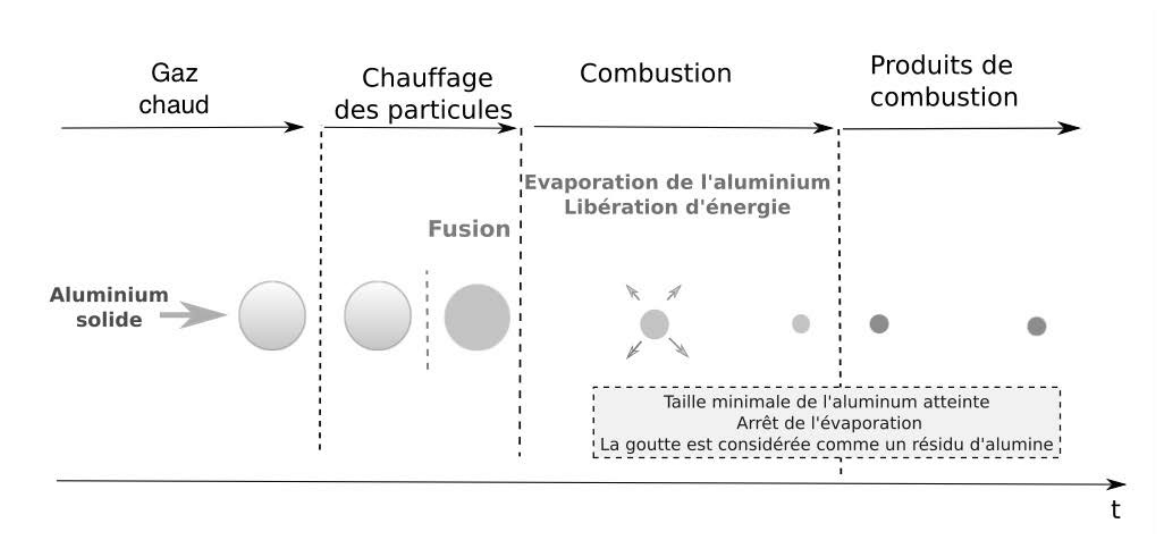


FIGURE 8.1 – Schéma de la combustion de l'aluminium au cours du temps

8.1.2 Combustion 0D

Avant d'utiliser ce modèle de combustion dans nos simulations de post-combustion, il est nécessaire de vérifier le bon fonctionnement de celui-ci. Une analyse 0D est réalisée comme celles faites dans le chapitre 4. La combustion de l'aluminium avec ce modèle est réalisée dans une maille cubique comme illustré par la Fig. 8.2. Cette maille est dimensionnée pour contenir une particule d'aluminium de $10\ \mu\text{m}$ et de l'air de telle sorte que l'oxygène soit présent en quantité stœchiométrique. Les deux phases sont initialement à la même température égale à 2000 K et à pression de 1 bar. À cette température, l'aluminium est initialement en phase liquide.

La Fig. 8.3 représente l'évolution de la température de l'air et de la taille de la goutte au cours du temps. L'aluminium est initialement à 2000 K comme le gaz, ce qui supprime le temps de chauffage et l'énergie nécessaire à la fusion de la particule. L'aluminium brûle progressivement ce qui conduit à une réduction de la taille de la particule. La chaleur dégagée par la combustion chauffe le gaz et sa température atteint 3510 K en fin de combustion. Cet instant est défini comme celui où la taille de la goutte d'aluminium atteint celle du résidu d'alumine définie initialement. Cette taille de résidu est de $7,5\ \mu\text{m}$, qui est celle obtenue dans nos simulations 0D présentées dans le chapitre 4. Une fois la taille atteinte, la particule d'aluminium ne s'évapore plus et devient un résidu d'alumine liquide.

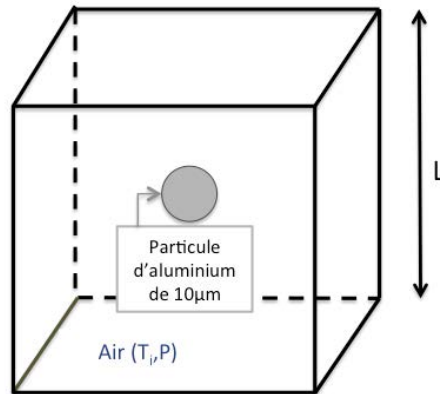


FIGURE 8.2 – Schéma du domaine utilisé pour la simulation de la combustion 0D de l'aluminium

La combustion d'une goutte d'aluminium de $10\mu\text{m}$ avec ce modèle a un temps de combustion d'environ $0,31\text{ms}$. Cette combustion est 2 fois plus rapide que celle mesurée dans le chapitre 4 à cause de l'arrêt de la combustion lorsque la taille de la particule devient égale à celle du résidu. La température atteint une valeur plus grande de 38K que celle mesurée dans le chapitre 4. Cette différence est essentiellement due à l'estimation de la chaleur dégagée par la réaction globale qui doit être légèrement supérieure à celle calculée dans le chapitre 4. Mises à part ces différences avec le modèle plus complexe présenté au chapitre 4, ce modèle simplifié permet de libérer la chaleur de la combustion d'aluminium et de suivre les résidus d'alumine en fin de combustion.

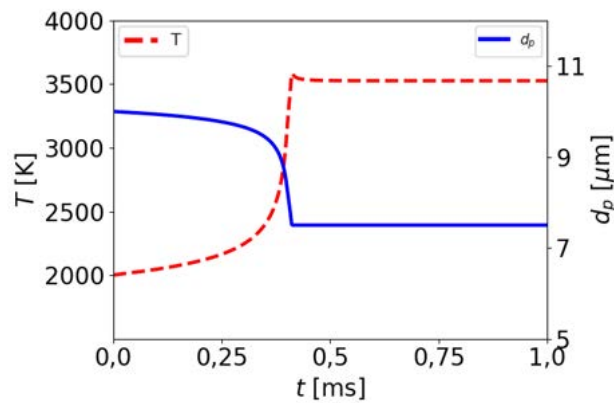


FIGURE 8.3 – Profils de la température du gaz et du diamètre de la particule durant de la combustion 0D de l'aluminium

8.2 Post-combustion avec des particules d'aluminium réactives

8.2.1 Initialisation de la post-combustion

La post-combustion est initialisée comme dans le chapitre 7 à partir d'un disque de gaz sous pression, à haute température et avec un profil radial de vitesse. Pour ce cas, les particules d'aluminium placées initialement sont de taille uniforme égale à $10\ \mu\text{m}$ qui donneront des résidus d'alumine d'une taille de $7,5\ \mu\text{m}$. La dimension finale des résidus d'alumine est celle obtenue à partir de la combustion des particules d'aluminium de taille $10\ \mu\text{m}$ à travers une flamme dans la section 5.4. La taille des particules ne suit pas une distribution polydispense car le modèle de combustion utilisé ne peut prendre en compte qu'une seule taille de résidu d'alumine. Il semblerait en effet peu probable que des particules d'aluminium de tailles très différentes conduisent à un résidu d'alumine de même diamètre. D'après la section 7.3, le fait de choisir une petite taille de particules fait que l'aluminium va être entraîné par l'écoulement et dispersé dans les produits de détonation, dans la zone de mélange et dans l'air derrière le choc primaire. Le nombre de particules initialement placées dans la boule de feu est le même que celui du chapitre 7 pour le cas à $10\ \mu\text{m}$, soit $5,8 \cdot 10^8$ particules. Ce nombre est associé à la masse maximale d'aluminium que l'on puisse injecter initialement dans la boule de feu avant que des gradients de température trop raides numériquement apparaissent.

Dans cette étude, la température des particules joue un rôle important à cause de l'évaporation et la température initiale des particules dans la boule de feu doit être définie. Dans les travaux de R. C. RIPLEY *et al.* [83], l'effet du passage de l'onde de détonation sur les particules d'aluminium pour le cas des explosifs liquides a été étudié. Il a été montré qu'une partie de la chaleur était transmise aux particules d'aluminium. Ce transfert permet d'augmenter la température des particules de quelques centaines de kelvins lors du passage de l'onde. Dans les travaux de G. BAUDIN *et al.* [9], une étude numérique a été faite sur le chauffage de l'aluminium durant les premiers instants de l'expansion du gaz. Elle a montré que les produits de détonation à haute température et à haute pression permettent à l'aluminium de passer en phase liquide et de monter rapidement en température. Néanmoins le court délai qui caractérise l'expansion du gaz ne permet pas d'évaporer de manière significative les particules micrométriques et ne modifie pas leur diamètre. Les seules particules qui peuvent brûler partiellement ou totalement durant la détonation sont les particules nanométriques, mais celles-ci ne sont pas étudiées dans notre cas. Ainsi le chauffage qui a lieu durant la détonation et les premiers instants de l'expansion des gaz nous impose d'initialiser la phase liquide avec une température élevée. Cette température initiale est définie à $2500\ \text{K}$ par rapport aux travaux de G. BAUDIN *et al.* [9] qui montre que les particules d'une dizaine de micromètres chauffent rapidement et peuvent atteindre cet ordre de grandeur en température.

8.2.2 Diagramme de marche

Le diagramme de marche de la post-combustion avec des particules d'aluminium réactives est illustré sur la Fig. 8.4 (a). À côté de ce diagramme, en Fig. 8.4 (b), est placé le diagramme de marche de la post-combustion avec des particules inertes étudié dans la section 7.2. Ces deux diagrammes sont très similaires concernant l'évolution du rayon de la boule de feu et la propagation des ondes de choc. Néanmoins l'influence de la combustion de l'aluminium va épaissir la zone de mélange et accélérer légèrement le choc secondaire, dont la différence n'est pas visible sur ces diagrammes et sera mise en avant la section 8.2.4. L'épaississement de la zone de mélange est visible lors de la phase de mélange asymptotique à $1,2\ \text{ms}$ avec une augmentation de $5,5\ \%$ par rapport au cas des particules inertes.

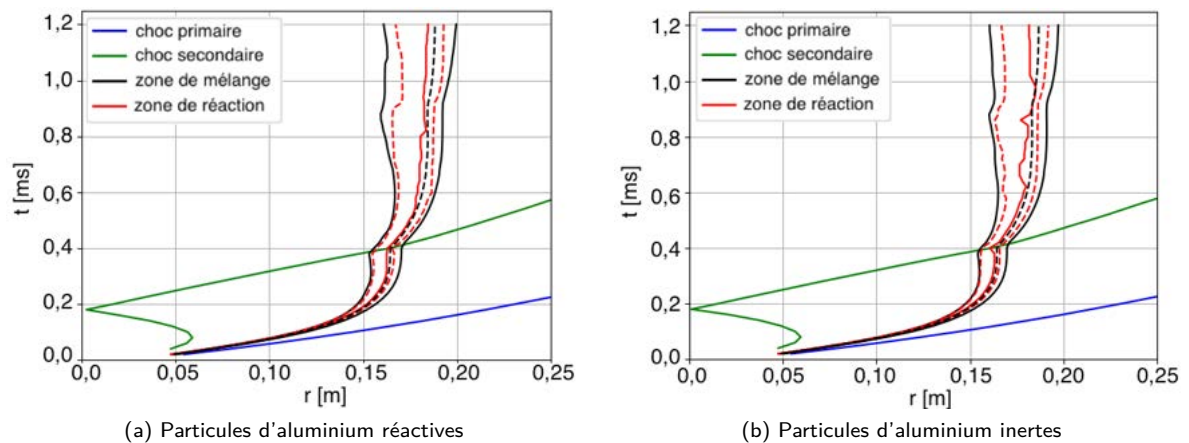
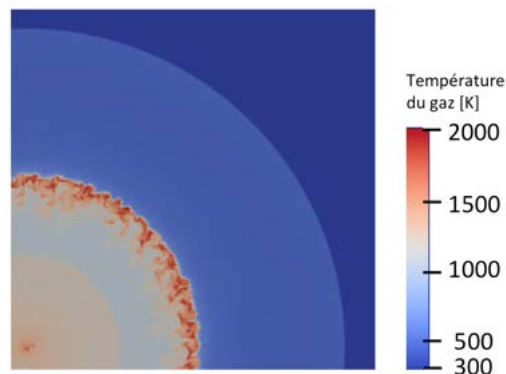


FIGURE 8.4 – Diagramme de marche de la post-combustion. Effet de la combustion des particules d'aluminium.

La faible influence de la combustion de l'aluminium dans ce cas d'étude est liée à la faible température dans la boule de feu qui limite l'évaporation et la combustion des particules. Dans les premiers instants de la phase d'expansion, les produits de détonation se détendent et se refroidissent rapidement. Au bout de 0,3 ms, soit en fin de la phase d'implosion, les gaz à l'intérieur de la boule de feu ont une température comprise entre 1100 K à 1400 K comme l'illustre l'extrait de la simulation présenté en Fig. 8.5. L'air derrière le choc primaire est à 600 K et la zone de mélange est la seule zone avec une température avoisinant 2000 K. L'évaporation de l'aluminium devient alors très difficile et peu de particules vont pouvoir brûler.

FIGURE 8.5 – Extrait de la simulation de la post-combustion représentant la température du gaz pendant la phase d'implosion ($t= 0,3$ ms)

La Fig. 8.6 représente l'évolution de la température des particules selon leur localisation initiale dans la boule de feu. Leur température est initialement de 2500 K et devient inférieure à 2000 K en 43 μ s, mais ce délai est trop court pour permettre à l'aluminium de brûler. Lors de la phase d'implosion entre 70 μ s et 380 μ s, les particules d'aluminium ont été dispersées. La majeure partie d'entre elles est localisée dans l'air derrière le choc primaire, en particulier celles qui se trouvaient initialement à plus de 25 mm du centre de la boule de feu. Ces particules sont refroidies à des températures inférieures à leur température de fusion et n'ont aucune possibilité de brûler. Les autres particules, qui restent dans la boule de feu, ont une température égale à celle des produits de détonation. Cette température est suffisamment grande pour permettre la combustion des particules d'aluminium mais la vitesse d'évaporation reste très faible. Ainsi les seules particules qui ont une température suffisamment élevée pour brûler rapidement sont celles qui séjournent dans la zone de mélange. Les particules d'aluminium localisées initialement à 18 mm du centre de la boule de feu interagissent avec

la zone de mélange à 0,8 ms. Leur température augmente progressivement en s'enfonçant dans la zone de mélange et atteint un maximum de température à 1670 K.

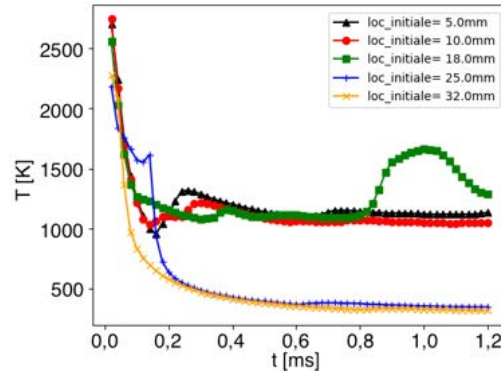


FIGURE 8.6 – Température des particules d'aluminium selon leur localisation initiale dans la boule de feu

8.2.3 Onde de choc secondaire

La Fig. 8.7 représente l'influence de la combustion des particules d'aluminium sur le choc secondaire à la fin de la phase de rechoc. Dans les premiers instants de la post-combustion, une faible fraction d'aluminium a brûlé et apporté de la chaleur aux produits de détonation. Des particules d'aluminium ont interagi avec la zone de mélange, l'ont perturbée et y ont brûlé partiellement. Cette interaction a alors augmenté la température dans cette zone. Durant la phase d'implosion et de rechoc, l'onde de choc secondaire traverse deux fois l'intérieur de la boule de feu et une fois la zone de mélange. La chaleur apportée dans ces zones a comme effet d'accélérer légèrement le choc secondaire. Le graphique met alors en évidence une augmentation de la vitesse du choc secondaire d'environ 2 % par rapport à celle du cas sans particules.

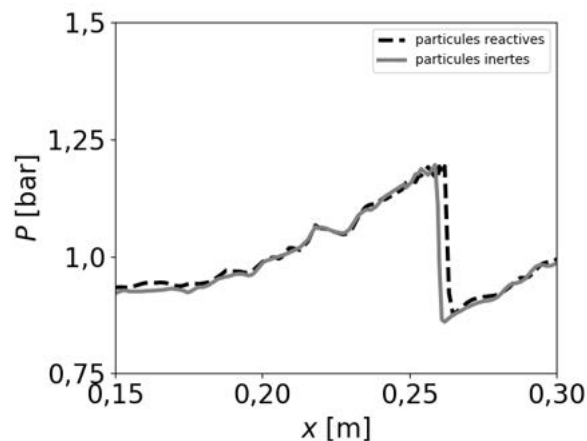


FIGURE 8.7 – Profils de pression de l'onde de choc secondaire à t = 0,6 ms

8.2.4 Chaleur dégagée par la post-combustion

La Fig. 8.8 représente l'influence des particules d'aluminium réactives sur la chaleur moyenne dégagée par les réactions de combustion entre les produits de détonation et l'air dans la zone de mélange. Les particules d'aluminium qui s'évaporent et brûlent dans la zone de mélange augmentent la température de celle-ci. A cause de cette augmentation de température, les réactions de combustion entre les produits de détonation et l'air s'accélèrent et dégagent plus de chaleur. Cette amplification des réactions de post-combustion a lieu durant la phase d'implosion. La phase de rechoc est marquée par le saut du taux de dégagement de chaleur à 0,38 ms. Une fois le choc secondaire passé, le taux de dégagement de chaleur du cas avec des particules réactives diminue pour tendre vers celui du cas sans particules. Cette diminution s'explique par la combustion complète des particules dans la zone de mélange. Il faudra attendre la phase de mélange asymptotique, soit $t > 1,1$ ms, pour retrouver une augmentation du taux de dégagement de chaleur. Cette augmentation est liée à l'arrivée progressive d'autres particules d'aluminium dans la zone de mélange.

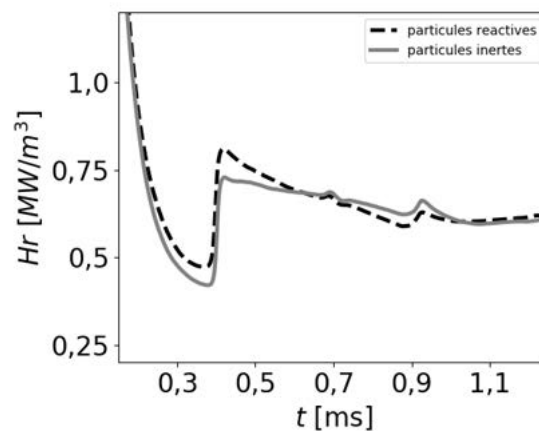


FIGURE 8.8 – Évolution de la chaleur dégagée instantanée dans l'ensemble du domaine de calcul au cours du temps

8.3 Conclusion la post-combustion avec des particules réactives

Le modèle de combustion de particules d'aluminium extrait des travaux de L. LACASSAGNE [61] permet de prendre en compte à la fois la chaleur dégagée par la combustion et la formation de particules d'alumine sans utiliser de schéma réactionnel. À partir d'une analyse 0D, ce modèle s'est montré être similaire sur plusieurs aspects à la combustion d'aluminium 0D mise en place dans le chapitre 4, mais trois éléments limitent l'utilisation de ce modèle. Le premier élément est le fait qu'une seule taille de particule d'alumine peut être considérée, ce qui oblige à utiliser une distribution de taille de particules monodisperse. Le deuxième élément est l'absence d'interaction avec la composition de la phase gazeuse. Le fait de brûler l'aluminium devrait consommer l'oxydant de la phase gazeuse. Le dernier élément est la constante définie pour l'énergie dégagée lors de la combustion. Cette valeur est la même si la particule brûle dans l'air et dans les produits de détonation. Il faudrait mettre en place une détection de la composition du gaz pour libérer la chaleur correspondant à la combustion avec le bon type d'oxydant. Ce modèle de combustion reste néanmoins utile pour étudier l'effet de la combustion de l'aluminium sur la post-combustion.

Le modèle de combustion de l'aluminium a été utilisé dans la simulation de post-combustion contenant des particules d'une taille de 10 μm . Comme pour l'étude faite dans le chapitre 7, les particules se dispersent rapidement dans l'ensemble de la boule de feu et dans l'air derrière le choc primaire. Dans notre cas d'étude, la boule de feu est moins intense en pression et en température que celle qui pourrait être obtenue après la

détonation de charge explosive condensée. La température au sein de la boule est basse et la zone de mélange qui accueille la combustion des produits de détonation avec l'air est le seul lieu où la température est supérieure à 1600 K. Ainsi seule une faible fraction d'aluminium brûle durant la post-combustion. Une partie des particules est brûlée au sein de la boule de feu avec les produits de détonation. Une autre partie des particules, dont celles qui interagissent avec la zone de mélange, brûlent rapidement et complètement si leur temps de séjour est assez long. Cette combustion apportera de la chaleur au sein de la boule de feu et amplifiera la post-combustion. Cet apport d'énergie aura comme conséquence d'accélérer légèrement la propagation du choc secondaire.

L'effet de la combustion de l'aluminium sur la post-combustion est faible quand ce cas d'étude est comparé au cas sans particules de la section 7.2. Cette faible différence est provoquée par deux éléments. Le premier élément est le nombre total de particules. Ce cas est fait avec $5,8 \cdot 10^8$ de particules de $10 \mu\text{m}$, soit une masse de 0,8 g qui est 33 fois plus petite que celle que contiendrait une charge explosive de B2213A de 2,5 cm de rayon dont la proportion massique d'aluminium est de 20 %. Malheureusement, nous n'avons pas réussi à mettre en place une simulation avec un grand nombre de particules à cause des forts gradients de température provoqués par la combustion de l'aluminium. Le maillage fin et le nombre raisonnable de particules suivies, permettant d'avoir des coûts de calcul modérés, conduisent à une dispersion des particules qui ne permet pas d'avoir une répartition homogène des particules d'une maille à l'autre. Pour corriger ce problème, il faut augmenter considérablement le nombre de particules suivies dans le domaine, ce qui augmente considérablement les temps de calcul et de post-traitement. Le second élément est la boule de feu initiale. Cette solution initiale est à 3000 K, soit une température très faible par rapport à celle des produits de détonation d'une charge explosive. Malgré le fait que la température dans la boule de feu diminue rapidement dans les premiers instants de la post-combustion, la température au sein de la boule de feu doit être plus favorable à la combustion des particules d'aluminium. Il serait alors nécessaire de se poser la question : AVBP est-il le code approprié pour l'analyse de la post-combustion avec des particules d'aluminium ?

Quatrième partie

Conclusion et Perspectives

Conclusion

La combustion de l'aluminium est un phénomène complexe qui a fait l'objet de nombreuses études expérimentales. Des flammes de différents types ont été étudiées et la température et la vitesse de flammes ont été mesurées pour plusieurs types de poudre d'aluminium. Dans le domaine numérique, le nombre d'études sur la combustion de l'aluminium présentes dans la littérature est plus restreint et ce nombre est encore plus réduit pour la combustion de l'aluminium durant la post-combustion d'une charge d'explosif condensé. Les cas présents dans la littérature modélisent la combustion de l'aluminium à partir de simulations Euler-Lagrange employant des modèles de changement de phase, de traînée et un schéma cinétique de combustion. Néanmoins, dans l'ensemble des études, la gestion de la formation de l'alumine liquide en fin de combustion est généralement très simplifiée.

Un modèle de combustion diphasique de l'aluminium avec l'air a été développé durant ces travaux de thèse dans le code AVBP. Ce modèle reprend la représentation lagrangienne des particules d'aluminium et la combustion de l'aluminium gazeux avec l'air grâce à un schéma cinétique réactionnel issu de la littérature. Toutefois, cette modélisation est originale vis-à-vis d'autres modèles de la littérature puisque la modélisation de la formation de l'alumine liquide sous la forme lagrangienne se rapproche au mieux de la physique. Elle est réalisée à partir d'une méthode de germination et d'un modèle de condensation proche de celui de Spalding pour l'évaporation. Cette méthode se base sur l'injection de germes nanométriques d'alumine avec les particules d'aluminium et a pour objectif de permettre la condensation de l'alumine gazeuse formée par les réactions de combustion. Cette particularité permet de suivre d'une façon lagrangienne l'évolution de la croissance et de la dynamique de la goutte d'alumine en fin de combustion. Par ailleurs, la représentation de cette goutte nous a permis de prendre en compte le rayonnement des gouttes chaudes d'alumine qui constitue une perte de chaleur non négligeable mise en avant dans la littérature. Ce rayonnement est modélisé simplement en considérant la goutte comme un corps gris qui rayonne vers un champ infini à température ambiante.

Le modèle de combustion diphasique de l'aluminium avec l'air a permis de mettre en place des simulations de combustion 0D et de flammes 1D. Ces différentes études numériques ont permis de valider la modélisation. Les cas 0D ont montré que le temps de combustion en phase gazeuse est très petit par rapport au temps d'évaporation des particules, ce qui permet de conclure que la combustion diphasique de l'aluminium est limitée par l'évaporation des particules. Les cas de flammes 1D ont permis d'évaluer l'évolution de la température et de la vitesse de flamme en fonction de divers paramètres. L'augmentation de la richesse accélère la flamme mais n'influence que très peu la température de la flamme. Cette tendance est proche de ce qui a été observé dans le domaine expérimental. Par ailleurs, l'augmentation de la taille des particules à richesse constante n'influence pas la température de la flamme, mais ralentit considérablement la flamme. Cette tendance est la conséquence de la limitation de la combustion par le phénomène d'évaporation des particules d'aluminium. La vitesse de flamme est aussi très dépendante de la température initiale du mélange air-particules à richesse et taille de particules constantes. L'augmentation de la température initiale accélère la flamme, réduit légèrement la température de flamme et diminue la quantité d'alumine condensée en fin de combustion. Cet effet est l'une des conséquences observables grâce à notre modèle de germination d'alumine. Une étude a également été faite sur l'influence du nombre de germes d'alumine injectés par particule d'aluminium dans la flamme. Les résultats ont montré que des flammes stœchiométriques utilisant des particules d'aluminium de taille supérieure à 5 μm peuvent être simulées avec ce modèle en injectant un germe d'alumine par particule d'aluminium. Cette configuration est celle où pour une particule d'aluminium se forme une goutte d'alumine en fin de combustion. Le

fait de ne pas utiliser un modèle de nucléation nous oblige à considérer le nombre de germes d'alumine injectés pour une particule d'aluminium comme un paramètre important de notre modélisation. Ce paramètre influence plus ou moins la flamme selon la taille des particules d'aluminium où, pour des tailles inférieures à $5\ \mu\text{m}$, des blocages de la chimie et une baisse de la température de flamme ont lieu. Ces problèmes s'accroissent avec l'augmentation du nombre de germes d'alumine injectés pour une particule d'aluminium.

Le modèle de combustion diphasique de l'aluminium a été utilisé pour simuler une flamme 2D aluminium-air. Cette flamme utilise une configuration proche de celle décrite dans les travaux de thèse de R. LOMBA, ce qui nous a permis de faire une comparaison entre les flammes numérique et expérimentale. Tout comme la flamme expérimentale, l'initialisation de la flamme 2D suit diverses étapes comme une diminution progressive de la température de l'air et une augmentation de la vitesse d'évaporation de l'aluminium. La flamme finale, très coûteuse en temps de calcul, a été mise en place et ses propriétés ont été mesurées. Comme pour les cas 1D, la température et la vitesse de flamme mesurées sont proches de celles données dans les travaux de R. LOMBA. La structure et la composition de la flamme ont été analysées comme l'évolution de l'évaporation des particules d'aluminium et de la formation des gouttes d'alumine à travers la flamme. Par ailleurs, cette flamme présente des déformations à sa surface qui apparaissent également dans le cas expérimental.

D'autre part, une étude a été faite sur la post-combustion d'une charge d'explosif condensé contenant des particules d'aluminium. Les simulations réalisées dans les travaux de thèse de S. COURTIAUD ont été reprises et modifiées pour y ajouter des particules d'aluminium. Les conditions rencontrées dans ces simulations sont moins extrêmes que celles rencontrées dans les boules de feu réelles et la post-combustion est sensiblement sous-évaluée à l'heure actuelle dans ces simulations. Les premières études numériques sur les cas de post-combustion utilisent des particules d'aluminium inertes pour nous permettre d'analyser leur dispersion. Cette étude a été faite en prenant en compte l'influence de la distribution de taille pour des particules allant de $1\ \mu\text{m}$ à $70\ \mu\text{m}$. Les résultats de ces simulations ont montré que la dynamique des particules est dépendante de leur taille. Les petites particules vont être rapidement entraînées par l'écoulement et seront dispersées au sein de la boule de feu, dans la zone de mélange et dans l'air derrière le choc primaire. Les grosses particules auront un comportement balistique et seront dominées par leur inertie transmise dans les premiers instants de l'expansion de la boule de feu. Cette inertie est directement liée au profil de vitesse radiale qui existe à l'instant initial dans la boule de feu et fait de la position initiale des particules d'aluminium un facteur important pour la dispersion. Ces particules seront rapidement en dehors de la boule de feu, et quelques-unes dépasseront le choc primaire lors de sa décélération. La présence des particules a une influence directe sur l'évolution de la boule de feu et sur la propagation de l'onde de choc secondaire. Le passage des particules à travers la zone de mélange déforme davantage la flamme située en bordure de la boule de feu de la boule de feu et augmente l'épaisseur de cette zone.

Enfin, nous avons étudié l'influence de la combustion de l'aluminium sur la post-combustion mais on n'a pas pu utiliser le modèle de combustion de l'aluminium mis en place précédemment. On utilise un modèle de combustion de particules isolées plus simple provenant de travaux numériques sur les moteurs à propergols solides. Les résultats ont montré que l'apport de chaleur provenant de la combustion de l'aluminium influence l'évolution de la boule de feu et la propagation de l'onde de choc. Au niveau de la zone de mélange, la combustion de l'aluminium apporte de l'énergie et augmente le taux de réaction dans cette zone. Pour l'onde de choc secondaire, l'apport de chaleur au sein de la boule de feu accélère l'onde lors de son passage sur les particules. Néanmoins, dans les simulations, la combustion des particules d'aluminium reste minime à cause des faibles températures au sein de la boule de feu. Les seules particules qui peuvent brûler entièrement sont celles séjournant dans la zone de mélange de la boule de feu. Que ce soit dans la boule de feu ou dans l'air choqué, les particules brûlent partiellement ou s'éteignent.

Perspectives des études

Le modèle de combustion diphasique mis en place a montré des résultats cohérents avec ceux de la littérature. Néanmoins des points peuvent être améliorés. Le premier point serait de remplacer notre méthode de germination d'alumine par un véritable modèle de nucléation. Ce modèle pourrait être inspiré de la formation de suie derrière les flammes. Le deuxième point à améliorer est le choix du nombre de germes d'alumine injectés pour une particule d'aluminium. Les études faites dans ces travaux de thèse ont montré que pour les particules d'aluminium de taille inférieure à $5\ \mu\text{m}$, le nombre de germes d'alumine injecté est trop grand si un germe d'alumine est injecté avec une particule d'aluminium. Il faudrait alors associer un nombre de germes d'alumine par particule d'aluminium qui évolue avec la taille de l'aluminium. Cette amélioration permettrait d'obtenir des flammes aluminium-air dont la taille est inférieure à $5\ \mu\text{m}$ sans avoir des effets numériques endothermiques derrière la flamme. Le troisième point est la condensation de l'alumine derrière le front de flamme. Il serait intéressant de travailler sur un véritable modèle de condensation qui emploie des temps caractéristiques et des tendances de croissance de gouttes plus proches de la réalité. Pour finir, le dernier point à améliorer serait d'étendre la combustion de l'aluminium à d'autres oxydants comme le CO_2 , le CO , le H_2O et le OH . Les réactions associées à ces espèces ont été écrites dans AVBP mais les vitesses de réactions sont plus rapides que celles avec l'air et une démarche de validation devra être faite comme celle menée dans ces travaux.

La simulation de la flamme 2D aluminium-air a montré de nombreuses similitudes avec la flamme de référence expérimentale, mais des améliorations peuvent y être apportées. La première amélioration serait de simuler la flamme en 2D axisymétrique au lieu de 2D plan. Cette modification permettrait d'avoir les mêmes conditions d'injection que la flamme de référence. La seconde amélioration serait de stabiliser une flamme 2D avec une flamme guide. Cette flamme attacherait le pied de flamme du sommet de l'injecteur, ce qui permettrait de stabiliser davantage la flamme. Cette stabilisation, accompagnée d'une amélioration des schémas numériques, conduirait à éviter l'apparition de déformations de sa structure qui nous oblige à ajouter de la viscosité artificielle. Par ailleurs, le fait d'attacher le pied de flamme éviterait à la flamme de rentrer dans l'injecteur et nous permettrait d'injecter de l'aluminium près de la paroi de l'injecteur.

Dans ces travaux de thèse, la post-combustion avec des particules d'aluminium réactives est une ouverture pour de futures études. Pour analyser la dispersion des particules d'aluminium durant une véritable post-combustion de charge d'explosif condensé, il est nécessaire d'initialiser la boule de feu avec des profils issus d'une détonation. En l'état, il est difficile de simuler des cas avec des températures, des pressions et des vitesses aussi importantes. Il faudrait alors travailler sur une modélisation plus robuste et reprendre les tables thermodynamiques étendues à des pressions et températures importantes qui avaient été utilisées dans les travaux de S. COURTIAUD. Pour la combustion de l'aluminium, le modèle de combustion de particule isolée est intéressant mais doit être amélioré pour notre cas. Premièrement il est nécessaire que les particules d'aluminium libèrent l'énergie correspondant au gaz environnant. Deuxièmement il faut que la combustion de la particule d'aluminium influence la composition du gaz en consommant l'oxydant associé. Troisièmement il faudrait associer une taille de résidu d'alumine selon la taille initiale de l'aluminium. Ainsi il nous serait possible d'injecter une distribution de taille des particules qui, après combustion, donnerait des résidus d'alumine de taille variable.

Bibliographie

- [1] AVBP website. <https://www.cerfacs.fr/avbp7x/index.php>, 22-06-2020, 2002.
- [2] Cantera website. <http://www.cerfacs.fr/cantera/>, 22-06-2020, 2017.
- [3] ALLEN, T. : *Particle size measurement Powder Technology Series, 4th edition, Chapman & Hall*. 1991.
- [4] ASLANOV, S. K., SHEVCHUK, V. G., KOSTYSHIN, Y. N., BOICHUK, L. V. et GOROSHIN, S. V. : Oscillatory combustion of air suspension. *Combustion, Explosions, and Shock Waves*, 29:162–169, 1993.
- [5] ASSAEL, M. J., KAKOSIMOS, K., BANISH, R. M., BRILLO, J., QUESTED, P. N., MILLS, K. C., NAGASHIMA, A. et WAKEHAM, W. A. : Reference data for the density and viscosity of aluminium and liquid iron. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 39(3), Sept 2006.
- [6] BACKER, W.E., COX, P.A., WESTINE, P.S., KUELESZ, J.J et STREHLOW, R.A. : *Explosion hazards and evolution*. Thèse de doctorat, 1983.
- [7] BASSET, A. B., DANIEL, E. et LORAUD, J. C. : Étude numérique et paramétrique de la combustion de particules d'aluminium. *Canadian journal of chemical engineering* 75, 5:938–948, 1997.
- [8] BAUDIN, G. : *Physique des explosifs : de l'amorçage aux effets des explosifs condensés. Mémoire d'habilitation à diriger des recherches*. 2013.
- [9] BAUDIN, G., GENETIER, M., ELIA, T. et CATOIRE, L. : Aluminum powder heat and combustion modeling inside the detonation products of high explosives. *Symposium of detonation*, 2019.
- [10] BAUER, P., CHINNAYA, A. et DE RESSÉGUIER, T. : *Ondes de choc et détonations : De la théorie aux applications*. Ellipse, 2015.
- [11] BAZYN, T., KRIER, H. et GLUMAC, N. : Evidence for the transition from the diffusion-limit in aluminium particle combustion. *Proceeding of the Combustion Institute*, (31):2012–2018, 2007.
- [12] BECKSTEAD M.W. : A summary of aluminium combustion. *OTAN- Research and technology Organization*, RTO Educational Notes EN-023 AVT-096, 2002.
- [13] BINI, M. et JONES, W. P. : Large-eddy simulation of particle-laden turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 614:207–252, 2008.
- [14] BOICHUK, L. V., SHEVCHUK, V. G. et SHVETS, A. I. : Flame propagation in two-component aluminum–boron gas suspensions. *Combustion, Explosion and Shock Waves*, 38:651–654, 2002.
- [15] BOIVIN, M. et SIMONIN, O. : Direct numerical simulation of turbulence modulation by particles in isotropic turbulence. *Journal of Fluid*, 1998.
- [16] BOUSSINESQ, J. : *Théorie analytique de la chaleur : mise en harmonie avec la thermodynamique et avec la théorie mécanique de la lumière*. 1903.
- [17] BROOKS K. P. BECKSTEAD M.W. : Dynamics of aluminium combustion. *Journal of Propulsion and Power*, 2016.
- [18] BUCHER, P., ERNST, L. et DRYER, F. L. : Detailed studies on the flame structure of aluminum particle combustion. *American Institute of Aeronautics and Astronautics*, 185:689–722, 2000.
- [19] CASSEL, H. M. : *Some Fundamental Aspects of Dust Flames. Report of Investigations 6551. U.S. Department of Interior, Bureau of Mines, Washington, DC*. 1964.
- [20] CERFACS. : *The AVBP Handbook*. 2011.

- [21] CHEN, Z. et FAN, B. : Flame propagation through aluminum particle cloud in a combustion tube. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 18:13–19, 2005.
- [22] COLIN, O., BENKENIDA, A. et ANGELBERGER, C. : 3rd modeling of mixing, ignition and combustion phenomena in highly stratified gasoline engine. *Oil and Gas Science and Technology*, 58(47-62), 2003.
- [23] COLLIN-BASTIANI, F. : Ethanol/air homogeneous two-phase flame. CERFACS. AVBP quality program form. 2017.
- [24] COOPER, M. A., KANESHIGE, M. J., PAHL, R. J., SNEDIGAR, S. et RENLUND, A. M. : Methods for evaluating aluminized RDX explosives. *Proceedings of the 13th International Detonation Symposium*, 2006.
- [25] COURTIAUD, S. : *Étude et simulation de la post-combustion turbulente des explosifs homogènes sous-oxygénés*. Thèse de doctorat, Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, 2018.
- [26] DESAI, S. R., WU, H., ROHLFING, C. M. et WANG, L.S. : A study of the structure and bonding of small aluminum oxide clusters by photoelectron spectroscopy. *The Journal of Chemical Physics*, 106(4):106 :1309, 1997.
- [27] DEVALS, C. : *Contribution à l'étude de l'interaction ondes de choc-particules*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 2002.
- [28] DODDS, J. et BALUAIS, G. : Caractérisation de la taille des particules. *Sciences Géologique*, 46(1-4):79–104, 1993.
- [29] DONEA, J. et HUERTA, A. : Finite element method for flow problems. *Wiley*, pages 107–109, 2003.
- [30] DREIZIN, W. L. et TRUNOV, M. A. : Surface phenomena in aluminum combustion. *Combustion and Flame*, 101(3):378–382, 1995.
- [31] DUPAYS, J., WEY, S. et FABIGNON, Y. : Steady and unsteady reactive two-phase computations in solid rocket motors with eulerian and lagrangian approaches. *AIAA/ASME/SAE/ASEE 37th Joint Propulsion Conference and Exhibit*, 2001.
- [32] ELIA, T. : *Étude théorique et expérimentale de l'amorçage par choc et de la détonation de compositions énergétiques intégrant des additifs oxydants métalliques*. Thèse de doctorat, Institut Polytechnique De Paris, 2019.
- [33] ESCOT, P. : *Études expérimentales et modélisation de la combustion des nuages de particules micrométriques et nanométrique d'aluminium*. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2007.
- [34] FEDE, P., SIMONIN, O., VILLEDIEU, P. et SQUIRES, K. D. : Stochastic modeling of the turbulent subgrid fluid velocity along inertial particle trajectories. *Proceeding of the Summer Program Center Turbulence Research Stanford University, Stanford, CA.*, pages 247–258, 2006.
- [35] FEDINA, E. : *Post-Detonation Afterburning of High Explosives*. Thèse de doctorat, Lund University, 2017.
- [36] FROST, D. L. et ZHANG, F. : The nature of heterogeneous blast explosives. *Proceeding 19th Military Aspects of Blast and Shock*, 2006.
- [37] GARCIA, M. : *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. Thèse de doctorat, CERFACS, 2009.
- [38] GLORIAN, J. : *Cinétique hétérogène pour la combustion de l'aluminium*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Techniques Avancées, 2014.
- [39] GLORIAN, J., GALLIER, S. et CATOIRE, L. : On the role of heterogeneous reactions in aluminum combustion. *Combustion and Flame*, 168:378–392, 2016.
- [40] GLOTOV, O.G., ONISHCHUK, A.A., KARASEV V.V., ZARKO, V.E. et BAKLANOV, A.M. : Size and morphology of the nanooxide aerosol generated by combustion of an aluminum droplet. *Doklady Physical Chemistry*, 413(59-62), 2007.
- [41] GOGULYA, M. F. et BRAZHNIKOV, M. A. : *Shock Waves Science and Technology, chapitre Detonation of Metalized Composite Explosives*, 4:217–286, 2009.

- [42] GOROSHSIN, S., FOMENKO, F. et LEE, J. : Burning velocities in fuel-rich aluminum dust clouds. *International Symposium on Combustion*, 26(2):1961–1967, 1996.
- [43] GOSSE, J. : Propriétés de transport des gaz à pression modérée. *Techniques de l'ingénieur*, 1991.
- [44] GOTTIPARTHI, K. C. et MENON, S. : Simulation of heterogeneous detonations and post-detonation turbulent mixing and afterburning. *Shock Compression of Condensed Matter*, 2011.
- [45] HAMIDOUCHE, Z., MASI, E., SIMONIN, O., FEDE, P., ANSART, R. et HEMATI, M. : Unsteady three-dimensional numerical simulations of methane combustion in dense fluidized bed. *ICMF-2016- 9th International Conference on Multiphase Flow*, 2016.
- [46] HAN, D. H. et SUNG, H. G. : A numerical study on heterogeneous aluminium dust combustion including particle surface and gas-phase reaction. *Combustion and Flame*, (206):112–122, 2019.
- [47] HARTMAN, K. : Ignition and combustion of aluminum particles in propellant gases. *In 8th JANNAF Combustion Meeting*, pages 1–24, 1971.
- [48] HELMOLTZ, H. : Discontinuirliche Flüssigkeitsbewegungen. *Monatsb. K. Akad. Berlin*, 23:215, 1868.
- [49] HENDERSON, C. B. : Drag coefficients of sphere in continuum and rarefied flows. *AIAA JOURNAL*, 14(6):707–708, 1976.
- [50] HONIG, R.E. et KRAMER, D.A. : Vapor pressure data for the solid and liquid elements. *RCA Rev*, 1969.
- [51] HUANG, Y., GRANT, A., YANG, V. et YETTER, R. A. : Combustion of bimodal nano/micron-sized aluminum particle dust in air. *Proceeding of Combustion Institute*, 31(2001-2009), 2007.
- [52] HUANG, Y., GRANT, A., YANG, V. et YETTER, R. A. : Effect of particle size on combustion of aluminium particule dust in air. *Combustion and Flame*, 156(5-13), 2009.
- [53] IGRA, O. et TAKAYAMA, K. : Shock tube study of the drag coefficient of a sphere in a non-stationary flow. *Proceeding of the Royal Society London A*, pages 491–497, 1993.
- [54] KARASEV, V.V., ONISHCHUK, A.A., KHROMOVA, S.A., GLOTOV, O.G., ZARKO, V.E., PILYUGINA, E.A. et TSAI, C.J. : Formation of metal oxide nanoparticles in combustion of titanium and aluminum droplets. *Combustion, Explosions, and Shock Waves*, 42(649-662), 2006.
- [55] KEANE, R. D. et ADRIAN, R. J. : Theory of cross-correlation analysis of PIV images. in F.T.M. Nieuwstadt. *Fluid Mechanics and Its Applications*, 14, 1993.
- [56] KIM, C. K., MOON, J. G., HWANG, J. S., LAI, M. C. et IM, K. S. : Afterburning of TNT explosive products in air with aluminum particles. *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 156(5-13), 2008.
- [57] KUHL, A. L. : Mixing in explosion. *UCRL-JC-115690.*, 1993.
- [58] KUHL, A. L. : Spherical combustion clouds in explosions. *23rd ICDERS*, july 2011.
- [59] KUO, K. K. : Principles of combustion. *J. Wiley and Son*, (22), 1986.
- [60] KWON, Y., GROMOV, A. et ILYN, A. : The mechanism of combustion of superfine aluminum powder. *Combustion and Flame*, 133(385-391), 2003.
- [61] LACASSAGNE, L. : *Simulations et analyses de stabilité linéaire du détachement tourbillonnaire d'angle dans les moteurs à propergol solide*. Thèse de doctorat, Centre Européen de Recherche et Formation Avancées en Calcul Scientifique (Toulouse), 2017.
- [62] LAMARQUE, N. : *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [63] LEADBETTER, J., RIPLEY, R. C., ZHANG, F. et FROST, D. L. : Multiple energy scaling of blast waves from heterogeneous explosives. *Proceedings of 21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, 2007.
- [64] LEITNER, M., LEITNER, T., SCHMON, A., AZIZ, K. et POTTLAGHER, G. : Thermophysical properties of liquid aluminium. *Metallurgical and materials transactions*, 48(6):3036–3045, june 2017.

- [65] LIN, T. H. et LAW, C. K. : Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute sprays. *International Journal of Heat and Mass Transfert*, 31(5):1023–1034, 1988.
- [66] LOMBA, R. : *Utilisation de la combustion métallique dans les machines thermiques*. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2016.
- [67] LORD KELVIN. : Hydrokinetic solutions and observations. *Philosophical Magazine*, 42:362–377, 1871.
- [68] LORD RAYLEIGH. : Investigation of the character of the equilibrium of an incompressible heavy fluid of variable density. *Scientific Papers*, 2:200–207, 1900.
- [69] MASHAYEK, F. : Numerical investigation of reacting droplets in homogeneous shear turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 405:1–36, 2000.
- [70] MAXEY, M. R. et RILEY, J. J. : Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *Physics of Fluids (1958-1988)* 26, 4:883–889, 1983.
- [71] GORDON, S. MCBRIDE, B. J. et MARTIN, A. R. : *Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species*. NASA, 1993.
- [72] MESHKOV, E.E. : Instability of the interface of two gases accelerated by a shockwave. *Izv. Akad Nauk SSSR, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, 4(15):151–157, 1960.
- [73] OLSEN, S. E. et BECKSTEAD, M. W. : Burn time measurement of single aluminum particles in steam and CO₂ mixtures. *Journal of Propulsion and Power*, 12(4):662–671, 1996.
- [74] ORLANDI, O. : *Modélisation et simulation numérique de la combustion d'une goutte isolée d'aluminium*. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2002.
- [75] OSEEN, C. W. et LELE, S. : Hydrodynamik. *vol.1. Akad. Verl.Ges.*, 1927.
- [76] PARR T. P., JOHNSON, C. et HANSON, D. : Evaluation of advanced fuels for underwater propulsion. *In 39th JANNAF Combustion Subcommittee Meeting.*, 2003.
- [77] PAULHIAC, D. : *Modélisation de la combustion d'un spray dans un brûleur aéronautique*. Thèse de doctorat, CERFACS, 2015.
- [78] POINSOT, T. et LELE, S. : Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 101(1):104–129, 1992.
- [79] POINSOT, T. et VEYNANTE, D. : *Theoretical and Numerical Combustion, Third Edition*. 2012.
- [80] PRENTICE, J. : Combustion of laser-ignited aluminum droplets in wet and dry oxidizers. *In 12th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, 1974.
- [81] RANZ, W. E. et MARSHALL, W. R. : Evaporation from drops. *Chemical Engineering Progress*, (48 : 173), 1952.
- [82] RICHTMYER, R.D. : Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids. *Communication on Pure and Applied Mathematics*, 13:297–319, 1960.
- [83] RIPLEY, R.C., ZHANG, F. et LIEN, FUE-SANG : Detonation interaction with metal particles in explosives. *Proceedings of the 13th International Detonation Symposium, IDS 2006*, pages 214–223, 01 2006.
- [84] RISHA, G. A., HUANG, Y., YETTER, A. et YANG, V. : Experimental investigation of aluminium particle dust cloud combustion. *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 2005.
- [85] SAROU-KANIAN, V. : *Étude expérimentale de la combustion des gouttes d'aluminium en convection forcée : Influence de l'atmosphère gazeuse*. Thèse de doctorat, Université d'Orléans, 2003.
- [86] SHOSHIN, Y. L. et DREIZIN, E. L. : Laminar lifted flame speed measurements for aerosols of metals and mechanical alloys. *AIAA JOURNAL*, 42(7):1416–1426, 2002.
- [87] SHUM-KIVAN, F. : *Simulation aux grandes échelles de flammes spray et modélisation de la combustion non-prémélangée*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2017.
- [88] SOMMERFELD, M. : Validation of a stochastic lagrangian modelling approach for inter-particle collisions in homogeneous isotropic turbulence. *International Journal of Multiphase Flow* 27., 10:1829–1858, 2001.
- [89] SVEHLA, T. : *Estimated Viscosities And Thermal Conductivities Of Gases At High Temperatures*. NASA Technical Report, Cleveland, R-132, 1962.

- [90] SWIHART, M.T. et CATOIRE, L. : Thermochemistry of aluminium species for combustion modelling from ab initio molecular orbital calculations. *Combustion and Flame*, 121:210–222, 2000.
- [91] TAYLOR, G. I. : The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. *Proc. R. Soc. London, Ser. A.*, 201:192–196, 1950.
- [92] TCHEN, C.-M. : *Mean value and correlation problems connected with the motion of small particles suspended in a turbulent fluid*. Thèse de doctorat, TU Delft, Delft University of Technology, 1947.
- [93] TRUNOV, M. A., SHOENITZ, M. et DREIZIN, E. L. : Effect of polymorphic phase transformations in Al₂O₃ film on oxidation kinetics of aluminum powders. *Combustion and Flame*, 140(4):310–318, 2005.
- [94] TRZINSKI, W. A., CUDZITO, S. et PASZULA, J. : Studies of free field and confined explosions of aluminium enriched RDX composition. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 32(6), 2007.
- [95] VARGEL, C. : Propriétés générales de l'aluminium et de ses alliages. *Technique de l'ingénieur — Matériaux — Étude des propriétés des métaux*, décembre 2005. réf :M4661 V1.
- [96] VERMOREL, O. : *Étude numérique et modélisation de la modulation de la turbulence dans un écoulement de nappe chargée en particules*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- [97] VOLT, F. et SCHEDLBAUER, F. : Analysis of post detonation of different explosive charges. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 24(3):182–188, 1999.
- [98] WASHBURN, E. B., TRIVEDI, J. N., CATOIRE, L. et BECKSTEAD, M.W. : The simulation of the combustion of micrometer- sized aluminium particles with steam. *Combustion Science and Technology*, 180(8):1502–1517, 2008.
- [99] WILSON, R. et WILLIAMS, F. : Burn time measurement of single aluminum particles in steam and CO₂ mixtures experimental study of the combustion of single aluminum particles in O₂/ar. *International Symposium on Combustion*, 62(8):833–845, 1971.
- [100] YAGODNIKOV, D.A., VORONETSKII, A.V. et LAPITSKII, V.I. : Flame propagation through an aluminum aerosuspension at reduced pressure. *Combustion, Explosions, and Shock Waves*, 31:524–531, 1995.
- [101] Enginneering TOOLBOX, éditeur. *Emissivity Coefficients Materials*. 2003, 06-02-2020.

Annexe A

Tables CHEMKIN pour l'aluminium et les oxydes d'aluminium

Les propriétés thermodynamiques de l'aluminium et ses oxydes sous forme gazeuse sont définies à partir du polynôme CHEMKIN (A.1), (A.2) et (A.3) [71]. Ce polynôme permet l'obtention de la capacité calorifique C_p , de l'enthalpie H et de l'entropie S du gaz en prélevant les coefficients dans les Figs. A.1, A.2 et A.3 dont l'utilisation est définie dans le tableau A.1.

$$\frac{C_p}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{H}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{S}{R} = a_1 \ln T + a_2T + \frac{a_3}{2}T^2 + \frac{a_4}{3}T^3 + \frac{a_5}{4}T^4 + a_7 \quad (\text{A.3})$$

```
AL          62987AL  1          2  G  0300.00  5000.00  0600.00  1
0.02559589E+02-0.01063224E-02 0.072028 3 E-06-0.02121105E-09 0.02289429E-13 2
0.03890214E+06 0.05234522E+02 0.027368 4 E+02-0.05912374E-02-0.04033938E-05 3
0.02322343E-07-0.01705599E-10 0.03886795E+06 0.04363880E+02 4
```

FIGURE A.1 – Table des coefficients polynomiaux au format CHEMKIN pour l'aluminium gazeux [38]

```
AL2O3      tpis96AL      2.0 3. 0. 0.G      200.000 6000.000 1000.      1
1.18224768E+01 1.72547969E-03 -6.77407352E-07 1.15824576E-10 -7.21083594E-15 2
-6.97100145E+04 -3.05568543E+01 5.63487396E+00 2.44276632E-02 -3.39723369E-05 3
2.31682578E-08 -6.27929522E-12 -6.82838850E+04 1.47501030E-02 -6.57754372E+04 4
```

FIGURE A.2 – Table des coefficients polynomiaux au format CHEMKIN pour l'alumine gazeuse

TABLE A.1 – Description de la table CHEMKIN

Ligne	Description	Format	Colonnes
1	nom de l'espèce	A15	1-15
	Code référence	A6	19-25
	Formule chimique : symboles et nombres	A2,F3.0	25-44
	Phase de l'espèce	A1	45
	Température basse, haute et pivot T_c	2F10.3	46-65
	Masse molaire	F13.5	66-78
2	numéro de la ligne	I1	80
	Coefficients a_i (i=1,5) pour $T > T_c$	5E15.8	1-75
3	numéro de la ligne	I1	80
	Coefficients b_i (i=1,2) pour $T > T_c$	2E15.8	1-30
4	Coefficients a_i (i=1,3) pour $T < T_c$	3E15.8	31-75
	numéro de la ligne	I1	80
	Coefficients a_i (i=4,5) pour $T < T_c$	2E15.8	1-30
	Coefficients b_i (i=1,2) pour $T < T_c$	2E15.8	31-60
	$H^\circ(298.15)/R$, K	E15.8	61-75
	numéro de la ligne	I1	80

ALO	tpis96	AL 1.0 1. 0. 0.G	200.000	6000.000	1000.	1
2.87812691E+00	1.96920280E-03	-3.86303536E-07	7.31791832E-12	2.48454782E-15		2
7.28872515E+03	9.56556843E+00	3.34913178E+00	7.30811097E-05	7.10157373E-06		3
-1.06139198E-08	4.70712402E-12	7.05728468E+03	6.97458001E+00	8.09656925E+03		4
ALO2	tpis96	AL 1.0 2. 0. 0.G	200.000	6000.000	1000.	1
6.82788443E+00	7.33105641E-04	-3.13759379E-07	5.96366292E-11	-3.91258986E-15		2
-6.86225611E+03	-7.06432998E+00	4.34294502E+00	8.65076281E-03	-8.91492593E-06		3
3.12927133E-09	9.49015044E-14	-6.25626126E+03	5.43603439E+00	-4.64944681E+03		4
AL2O	tpis96	AL 2.0 1. 0. 0.G	200.000	6000.000	1000.	1
6.83557723E+00	6.85036558E-04	-2.69320700E-07	4.60912632E-11	-2.87128689E-15		2
-2.00793927E+04	-9.02360368E+00	4.07405095E+00	1.12981458E-02	-1.66855499E-05		3
1.20474407E-08	-3.43957451E-12	-1.94653414E+04	4.50607534E+00	-1.78737275E+04		4
AL2O2	tpis96	AL 2.0 2. 0. 0.G	200.000	6000.000	1000.	1
9.14886135E+00	1.38425788E-03	-5.42174706E-07	9.25638703E-11	-5.75686436E-15		2
-5.15186949E+04	-1.84651707E+01	4.83765565E+00	1.67010188E-02	-2.23411191E-05		3
1.48421603E-08	-3.96196410E-12	-5.04957125E+04	2.97081413E+00	-4.84809794E+04		4
O	g 8/970	1.E-1. 0. 0.G	298.150	6000.000	1000.	1
2.48542028E+00	2.56978695E-05	-1.28833378E-08	1.65525487E-12	1.09933344E-16		2
1.87940874E+05	4.47425446E+00	2.50000000E+00	0.00000000E+00	0.00000000E+00		3
0.00000000E+00	0.00000000E+00	1.87935284E+05	4.39337676E+00	1.88680659E+05		4

FIGURE A.3 – Table des coefficients polynomiaux au format CHEMKIN pour les oxydes d'aluminium gazeux

Annexe B

Schéma réactionnel complet de combustion d'aluminium de Swihart-Catoire

Les réactions élémentaires de la combustion de l'aluminium sont illustrées ci-après et sont suivies de leur facteur pré-exponentiel [mol.cm.s], leur coefficient de température et leur température d'activation. [38, 98]

TABLE B.1 – Mécanisme réactionnel de l'oxydation de l'aluminium avec l'air (tableau construit à partir de [33])

N°	Réactions	$A_{f,j}$ [mol.cm.s]	β [-]	$E_{a,j}/R$ [K]
1	$\text{Al}_{(g)} + \text{HCl} = \text{AlCl} + \text{H}$	9.27e8	1,5	-326.0
2	$\text{AlCl} + \text{HCl} = \text{AlCl}_2 + \text{H}$	4,75e-2	3,98	7734.0
3	$\text{AlCl} + \text{HCl} = \text{AlCl}_2 + \text{H}$	9,55e+4	2,55	15970.0
4	$\text{AlH}_2 + \text{HCl} = \text{AlH}_2\text{Cl} + \text{H}$	5e+2	3,0	0.0
5	$\text{AlH}_3 + \text{H} = \text{AlH}_2 + \text{H}_2$	4,75e+9	1,5	0.0
6	$\text{AlHCl}_3 + \text{H} = \text{AlHCl} + \text{HCl}$	3,45e+2	1,64	10610.0
7	$\text{AlHCl}_2 + \text{H} = \text{AlHCl}_2 + \text{H}_2$	1,25e+2	1,78	318.0
8	$\text{AlH}_2\text{Cl} + \text{H} = \text{AlHCl} + \text{H}_2$	3,17e+2	1,63	10321.0
9	$\text{AlCl}_3 + \text{H} = \text{AlCl}_2 + \text{HCl}$	3.76e+2	1,63	10321.0
10	$\text{AlCl}_3 + \text{M} = \text{AlCl}_2 + \text{Cl} + \text{M}$ Low :1,7e+15 0,0 43602,0 Troé :0,38 309,0 5695,0 7478,0	1,7e+15	0,0	54788,0
11	$\text{AlCl}_2 + \text{M} = \text{AlCl} + \text{Cl} + \text{M}$ Low :1,63e+15 0,0 26015,0 Troé :-0,17 1307,0 376,0 2209,0	1,92e+14	0,0	32291,0
12	$\text{AlMCl} + \text{M} = \text{AlCl} + \text{H} + \text{M}$ Low :3,36e+14 0,0 14180,0 Troé :-0,6 643,0 34609,0 250,0	4,94e+15	0,0	17284,0
13	$\text{AlH}_2 + \text{M} = \text{AlH}_2 + \text{H} + \text{M}$ Low :9,68e+14 0,0 19962,0 Troé :5,1 21,6 493,0 942,0	1,46e+15	0,0	23376,0

N°	Réactions	$A_{f,j}$ [mol.cm.s]	β [-]	$E_{a,j}/R$ [K]
14	$\text{AlH}_3 + \text{M} = \text{AlH} + \text{H}_2 + \text{M}$ Low :1,01e+15 0,0 27089,0 Troie :0,06 885,0 552,0 3807,0	1,48e+13	0,0	30756,0
15	$\text{AlH}_2\text{Cl} + \text{M} = \text{AlH} + \text{HCl} + \text{M}$ Low :1,96e+15 0,0 31774,0 Troie :0,65 3323,0 299,0 13590,0	3,6e+14	0,0	37351,0
16	$\text{AlH}_2\text{Cl} + \text{M} = \text{AlH} + \text{H}_2 + \text{M}$ Low :1,95e+15 0,0 31774,0 Troie :0,99 -951,0 1613,0 187,0	4,47e+13	0,0	37840,0
17	$\text{AlHCl}_2 + \text{M} = \text{AlCl} + \text{HCl} + \text{M}$ Low :4,07e+15 0,0 29140,0	1,63e+12	0,0	33016,0
18	$\text{Al} + \text{H} + \text{M} = \text{AlH} + \text{M}$ HCl :3	1,6e+17	-0,34	0,0
19	$\text{Al} + \text{Cl} + \text{M} = \text{AlCl} + \text{M}$ HCl :3	1,2e+17	-0,20	0,0
20	$\text{AlH}_3 + \text{Cl} = \text{AlH}_2 + \text{HCl}$	4,75e+9	1,5	0,0
21	$\text{AlH}_2\text{Cl} + \text{Cl} = \text{AlHCl} + \text{HCl}$	3,17e+9	1,5	0,0
22	$\text{AlHCl}_2 + \text{Cl} = \text{AlHCl}_2 + \text{HCl}$	1,58e+9	1,5	0,0
23	$\text{Cl}_2 + \text{AlHCl} = \text{AlHCl}_2 + \text{Cl}$	1,00e+3	3,0	0,0
24	$\text{Cl}_2 + \text{AlCl} = \text{AlHCl}_3 + \text{Cl}$	1,00e+3	3,0	0,0
25	$\text{AlH} + \text{H} = \text{Al} + \text{H}_2$	1,00e+13	0,0	0,0
26	$\text{AlH} + \text{Cl} = \text{AlCl} + \text{H}$	1,00e+13	0,0	0,0
27	$\text{AlH} + \text{Cl} = \text{Al} + \text{HCl}$	1,00e+13	0,0	0,0
28	$\text{AlH}_2 + \text{H} = \text{AlH} + \text{H}_2$	2,00e+13	0,0	0,0
29	$\text{AlH}_2 + \text{Cl} = \text{AlH} + \text{HCl}$	2,00e+13	0,0	0,0
30	$\text{AlCl} + \text{H} = \text{AlCl} + \text{H}_2$	1,00e+13	0,0	0,0
31	$\text{AlHCl} + \text{Cl} = \text{AlCl} + \text{HCl}$	1,00e+13	0,0	0,0
32	$\text{H}_2 + \text{M} = \text{H} + \text{H} + \text{M}$ HCl :3	2,23e+14	0,0	48350,0
33	$\text{Cl}_2 + \text{M} = \text{Cl} + \text{Cl} + \text{M}$ HCl :3	2,3e+13	0,0	23630,0
34	$\text{HCl} + \text{M} = \text{H} + \text{Cl} + \text{M}$ HCl :10	9,0e+13	0,0	44000,0
35	$\text{Cl}_2 + \text{H} = \text{HCl} + \text{Cl}$	3,31e+14	0,0	1460,0
36	$\text{H}_2 + \text{Cl} = \text{HCl} + \text{H}$	2,88e+8	1,58	1610,0
37	$\text{AlCl} + \text{Cl}_2 = \text{AlCl}_2 + \text{Cl}$	1,97e+7	2,0	-574,0
38	$\text{Al} + \text{Cl}_2 = \text{AlCl} + \text{Cl}$	7,43e+7	1,5	-74,0
39	$\text{Al} + \text{CO}_2 = \text{AlO} + \text{CO}$	1,74e+14	0,0	3221,0
40	$\text{AlO} + \text{CO}_2 = \text{AlO}_2 + \text{CO}$	1,5e+10	0,0	-400,0
41	$\text{Al} + \text{O}_2 = \text{AlO} + \text{O}$	9,72e+14	0,0	80,5
42	$\text{Al} + \text{O} + \text{M} = \text{AlO} + \text{M}$ HCl :3 H ₂ :2,8 O ₂ :1,1 CO ₂ :4,3 CO :2,1	3,0e+17	-1,0	0,0
43	$\text{AlO} + \text{O}_2 = \text{AlO}_2 + \text{O}$	4,62e+14	0,0	10008,0
44	$\text{O}_2 + \text{M} = \text{O} + \text{O} + \text{M}$	1,2e+14	0,0	54244,0
45	$\text{CO}_2 + \text{M} = \text{CO} + \text{O} + \text{M}$ Low :5,1e+14 0,0 55561,0	9,0e+12	0,0	65274,0
46	$\text{CO} + \text{O}_2 = \text{CO}_2 + \text{O}$	2,53e+12	0,0	24001
47	$\text{AlCl} + \text{CO}_2 = \text{OAlCl} + \text{CO}$	1,5e+12	0,0	7550,0
48	$\text{AlO} + \text{Cl}_2 = \text{OAlCl} + \text{Cl}$	1,8e+14	0,0	1250,0
49	$\text{AlO} + \text{HCl} = \text{OAlCl} + \text{H}$	3,38e+13	0,0	139,0
50	$\text{AlCl} + \text{O}_2 = \text{OAlCl} + \text{O}$	2,53e+12	0,0	16100,0

N°	Réactions	$A_{f,j}$ [mol.cm.s]	β [-]	$E_{a,j}/R$ [K]
51	$\text{Al} + \text{H}_2\text{O} = \text{H} + \text{AlOH}$	1,14e+12	0,0	442,8
52	$\text{Al} + \text{H}_2\text{O} = \text{AlO} + \text{H}_2$	9,6e+13	0,0	2868,6
53	$\text{HCl} + \text{O} = \text{OH} + \text{Cl}$	3,37e+3	2,87	1765,7
54	$\text{HCl} + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{Cl}$	2,7e+7	1,65	-111,86
55	$\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	6,2e+16	-0,6	0,0
56	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$	1,59e+17	-0,927	8492,0
57	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{H}$	3,87e+4	2,7	3151,5
58	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	2,16e+8	1,51	1732,1
59	$\text{OH} + \text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	2,1e+8	1,4	-199,7
60	$\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	8,4e+21	-2,0	0,0
	$\text{H}_2 : 1,9 \text{ H}_2\text{O} : 9,5 \text{ O}_2 : 2,6 \text{ CO}_2 : 2,6 \text{ CO} : 2,6$			
61	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	7,0e+21	-0,8	0,0
62	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{OH} + \text{OH}$	1,5e+14	0,0	505,2
63	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{H}_2 + \text{O}_2$	2,5e+13	0,0	348,8
64	$\text{HO}_2 + \text{H} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	5,0e+12	0,0	709,5
65	$\text{HO}_2 + \text{O} = \text{O}_2 + \text{OH}$	2,0e+13	0,0	0,0
66	$\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	6,02e+13	0,0	0,0
67	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	4,20e+14	0,0	6030,0
68	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} = \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	1,00e+17	0,0	22854,1
	$\text{H}_2 : 2,9 \text{ H}_2\text{O} : 18,5 \text{ O}_2 : 1,2 \text{ CO}_2 : 4,3 \text{ CO} : 2,1$			
69	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	1,700e+12	0,0	1888,5
70	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} = \text{HO}_2 + \text{OH}$	1,00e+13	0,0	1804,2
71	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} = \text{HO}_2 + \text{OH}$	2,800e+13	0,0	3223,6
72	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1,00e+12	0,0	721,7
73	$\text{CO} + \text{OH} + \text{M} = \text{CO}_2 + \text{H} + \text{M}$	2,45e-3	3,68	-625,46
	$\text{Low} : 1,17e+7 \text{ } 1,35 \text{ } -360,0$			
74	$\text{HO}_2 + \text{CO} = \text{CO}_2 + \text{OH}$	1,500e+14	0,0	11872,1
75	$\text{Al}_2\text{O}_3 = \text{Al}_2\text{O}_2 + \text{O}$	3,00e+15	0,0	49144,4
76	$\text{Al}_2\text{O}_3 = \text{AlO}_2 + \text{AlO}$	3,00e+15	0,0	63915,4
77	$\text{Al}_2\text{O}_{3c} = \text{Al}_2\text{O}_2 + \text{O}$	3,00e+15	0,0	36864,6
79	$\text{Al}_2\text{O}_2 = 2\text{AlO}$	1,00e+15	0,0	74937,1
80	$\text{Al}_2\text{O}_2 = \text{Al} + \text{AlO}_2$	1,00e+15	0,0	74937,1
81	$\text{Al}_2\text{O}_2 = \text{Al}_2\text{O} + \text{O}$	1,00e+15	0,0	52466
82	$\text{AlO}_2 = \text{AlO} + \text{O}$	1,00e+15	0,0	44564,6
83	$\text{Al}_2\text{O} = \text{AlO} + \text{Al}$	1,00e+15	0,0	67035,7
84	$\text{OAlCl} = \text{O} + \text{AlCl}$	1,00e+15	0,0	51006,5
85	$\text{OAlCl} = \text{AlO} + \text{Cl}$	1,00e+15	0,0	51580,2
86	$\text{AlOH} = \text{AlO} + \text{H}$	1,00e+15	0,0	57725,2
87	$\text{AlOH} = \text{Al} + \text{OH}$	1,00e+15	0,0	66431,8
88	$\text{O} + \text{Cl}_2 = \text{Cl} + \text{ClO}$	2,50e+12	0,0	1371,1
89	$\text{OH} + \text{Cl}_2 = \text{HOCl} + \text{Cl}$	1,00e+12	0,0	914,1