

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LA LITTÉRATURE	3
1.1 Introduction.....	3
1.2 Flammes laminaires de prémélange.....	3
1.2.1 Définitions et notions de base.....	4
1.2.2 Tendances générales	5
1.3 Mélanges diphasiques	8
1.3.1 Quelques définitions et notations.....	8
1.3.2 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale.....	10
1.3.3 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse liquide	17
1.3.4 Évolution de la vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes.....	23
1.3.5 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la pression initiale	27
1.4 Modèle monodimensionnel de la propagation de flammes prémélangées	29
1.5 Bilan.....	31
1.6 Objectifs de l'étude.....	32
CHAPITRE 2 MODÈLE NUMÉRIQUE.....	35
2.1 Introduction.....	35
2.2 Équations et modèles	35
2.2.1 Présentation du problème et hypothèses de base	35
2.2.2 Phase gazeuse - Équations et conditions aux limites	36
2.2.3 Phase liquide - Équations et conditions aux limites.....	42
2.2.4 Chimie et propriétés.....	46
2.3 Résolution numérique	46
2.3.1 Discrétisation numérique	47
2.3.2 Procédure de calcul	47
2.4 Définition du modèle	49
2.4.1 Incertitude des résultats.....	49
2.4.2 Étude de sensibilité pour flammes gazeuses.....	49
2.4.3 Étude de sensibilité pour flammes diphasiques	53
2.4.4 Injection des gouttes	53
2.5 Méthodologie de paramétrage.....	54
2.5.1 Degré de convergence des calculs, résolution temporelle et spatiale	54
2.5.2 Profils initiaux.....	56
2.5.3 Procédure itérative de paramétrage en diphasique.....	56
2.6 Validation.....	58
2.6.1 Validation de la cinétique utilisée.....	58
2.6.2 Validation du modèle d'évaporation de goutte.....	61
2.7 Bilan.....	61

CHAPITRE 3	RÉSULTATS NUMÉRIQUES.....	63
3.1	Introduction.....	63
3.2	Résultats numériques	63
3.2.1	Épaisseur de flamme et richesse effective	64
3.2.2	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale.....	66
3.2.3	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse liquide	77
3.2.4	Évolution de la vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes.....	83
3.2.5	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la pression des gaz frais.....	90
3.2.6	Analyse complémentaire des profils.....	94
3.3	Corrélations pour la vitesse de flamme.....	102
3.4	Bilan.....	105
CONCLUSION.....		107
RECOMMANDATIONS		109
ANNEXE I	EQUIVALENCE DES NOTATIONS.....	111
ANNEXE II	QUANTITÉS DE BASE.....	113
ANNEXE III	PROPRIÉTÉS DES GOUTTES	117
ANNEXE IV	THÉORIE DE FILM.....	121
ANNEXE V	DIFFÉRENCES FINIES.....	125
ANNEXE VI	CALCULS POUR PROFIL INITIAL DE BASE.....	129
BIBLIOGRAPHIE.....		133

LISTE DES TABLEAUX

		Page
Tableau 1.1	Liste des tendances étudiées dans la littérature.....	9
Tableau 1.2	Récapitulatif des tendances de la littérature - S_L vs ϕ_o	16
Tableau 1.3	Récapitulatif des tendances de la littérature - S_L vs ϕ_l	22
Tableau 1.4	Récapitulatif des tendances de la littérature - S_L vs d_i	27
Tableau 1.5	Récapitulatif des tendances de la littérature- S_L vs P_u	29
Tableau 3.1	Liste des cas simulés avec le modèle.....	64
Tableau 3.2	Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs ϕ_o	76
Tableau 3.3	Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs ϕ_ℓ	82
Tableau 3.4	Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs d_i	89
Tableau 3.5	Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs P_u	93
Tableau 3.6	Valeurs des constantes de la corrélation développée pour les flammes en milieu gazeux.....	102
Tableau 3.7	Valeurs des constantes de la corrélation développée pour les flammes en milieu diphasique.....	103

LISTE DES FIGURES

		Page
Figure 1.1	Schéma illustrant la propagation d'une flamme	5
Figure 1.2	Évolution de la vitesse de flamme S_L en fonction de la richesse ϕ du mélange gazeux pour de l'éthanol et à différentes conditions : $P = 1 \text{ bar} \ \& \ T = 423 \text{ K}$ (Broustail, 2012); $P = 3 \text{ bar} \ \& \ T = 423 \text{ K}$ (Broustail, 2012); $P = 1 \text{ bar} \ \& \ T = 298 \text{ K}$ (Egolfopoulos et al., 1992)	6
Figure 1.3	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,04 et 0,14 et d_i entre 4 et 7 μm , et pour des prémélanges gazeux - Données tirées de Hayashi et al. (1975)	11
Figure 1.4	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,14 et d_i entre 4 et 20 μm , et pour des prémélanges gazeux - Données tirées de Hayashi et al. (1976)	12
Figure 1.5	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o à $P_u = 2 \text{ bar}$ pour des mélanges diphasiques avec $\phi_\ell = 0,3$ et d_i entre 7,5 et 11 μm , et pour des prémélanges gazeux - Données tirées de Nomura et al. (2000; p.1001).	14
Figure 1.6	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec P_u entre 2 et 10 bar, $\phi_\ell = 0,2$ et $d_i = 8,5 \mu\text{m}$ - Données tirées de Nomura et al. (2007; p.2136 et 2137)	15
Figure 1.7	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ à $P_u = 2 \text{ bar}$ pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 7,5 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent - Données tirées de Nomura et al. (2000)	17
Figure 1.8	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) à ceux d'Hayashi et al. (1976) avec $d_i \leq 20 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,15$	18
Figure 1.9	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) pour de l'éthanol et avec $\phi_o = 0,8$ et $d_i = 30 \mu\text{m}$, à ceux de Ballal et Lefebvre (1981) pour de l'iso-octane et avec $d_i = 28 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,65$ ($\phi_\ell \leq 0,5$)	19

Figure 1.10	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ à $P_u = 2$ bar pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$ - Données tirées de Nomura et al. (2000).....	20
Figure 1.11	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) à ceux d'Hayashi et al. (1976) avec $\phi_o = 1,4$ et $d_i \leq 20 \mu\text{m}$	20
Figure 1.12	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec P_u entre 2 et 8 bar, $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$ - Données tirées de Nomura et al. (2007)	21
Figure 1.13	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i à $P_u = 2$ bar pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,3 et 0,41 et $\phi_o = 0,8$ - Données tirées de Nomura et al. (2000; p.1001)	23
Figure 1.14	Schéma illustrant la distribution de la fraction massique de carburant autour d'une goutte en pleine évaporation.....	24
Figure 1.15	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,4$ et : $\phi_\ell = 0,14$ (Hayashi et al., 1976); $\phi_\ell = 0,3$ (Nomura et al., 2000).....	26
Figure 1.16	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8,5 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,6 et 1,2, et pour des mélanges gazeux équivalents - Données tirées de Nomura et al. (2007; p.2136)	28
Figure 2.1	Schéma illustrant les conditions aux limites imposées pour le profil de température	41
Figure 2.2	Schéma du film entourant la goutte	45
Figure 2.3	Schéma illustrant la procédure itérative de paramétrage du logiciel pour les cas diphasiques	48
Figure 2.4	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la densité linéique de nœuds dans un maillage de 8 cm de long ($\phi = 1$; $P_u = 1$ bar et $T_u = 300$ K)	50
Figure 2.5	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la longueur du domaine ($\phi = 1$; $P_u = 1$ bar et $T_u = 300$ K).....	51
Figure 2.6	Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la longueur de la zone en amont de la flamme ($\phi = 1$; $P_u = 1$ bar et $T_u = 300$ K)	52

Figure 2.7	Schéma illustrant la procédure itérative de paramétrage du logiciel pour les cas diphasiques.....	57
Figure 2.8	Évolution de S_L en fonction de ϕ pour des prémélanges gazeux à $P_u = 1$ bar & $T_u = 423$ K - Comparaison de la tendance du modèle à des tendances expérimentales tirées de la littérature.....	59
Figure 2.9	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ pour des prémélanges gazeux à $P_u = 2$ bar & $T_u = 300$ K - Comparaison de la tendance du modèle aux tendances expérimentales, tirées de Hayashi et al. (1976) et de Nomura et al. (2000).....	60
Figure 3.1	Schéma illustrant la définition de l'épaisseur de flamme	65
Figure 3.2	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,04 et 0,21 et $d_i = 4$ μm , et pour des prémélanges gazeux	67
Figure 3.3	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Hayashi et al. (1975) à ceux du modèle avec $d_i = 4$ μm et $\phi_\ell \leq 0,14$	68
Figure 3.4	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour des prémélanges gazeux	70
Figure 3.5	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Hayashi et al. (1976) à ceux du modèle avec $d_i \leq 20$ μm et $\phi_\ell = 0,07$	71
Figure 3.6	Évolution de l'épaisseur de flamme en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour des prémélanges gazeux.....	71
Figure 3.7	Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 20 et 40 μm	72
Figure 3.8	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8$ μm , $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar, et pour des prémélanges gazeux.....	73
Figure 3.9	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2007) à ceux du modèle pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8$ μm , $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar.....	74

XVIII

Figure 3.10	Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar, et pour des prémélanges gazeux	75
Figure 3.11	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent	77
Figure 3.12	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Ballal et Lefebvre (1981) pour de l'iso-octane et avec $d_i = 28 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,65$, et par Nomura et al. (2000) à ceux du modèle pour de l'éthanol et avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et $d_i = 11$ et 40 μm	78
Figure 3.13	Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 11 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent	79
Figure 3.14	Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$, à ceux du modèle avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,2$ et d_i entre 11 et 40 μm	80
Figure 3.15	Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,2$ et d_i entre 11 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent	81
Figure 3.16	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,07$ et ϕ_o entre 0,8 et 1,2, et pour les prémélanges gazeux équivalents	83
Figure 3.17	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,3 et $\phi_o = 0,8$, et pour un prémélange gazeux équivalent	84
Figure 3.18	Comparaison des résultats du modèle avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell = 0,3$ aux résultats obtenus par Nomura et al. (2000) avec $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell = 0,3$, par Ballal et Lefebvre (1981) avec $\phi_o = 0,65$ et $\phi_\ell = 0,33$, et par Neophytou (2010) avec $\phi_\ell = \phi_o = 0,6$	85
Figure 3.19	Évolution de la richesse effective en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,3 et $\phi_o = 0,8$, et pour un prémélange gazeux équivalent	86
Figure 3.20	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,2 et $\phi_o = 1,2$, et pour un prémélange gazeux équivalent	87

Figure 3.21	Comparaison des résultats du modèle avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,2$ et $\phi_\ell = 0,15$ aux résultats obtenus par Lin et Sheu (1991) avec $\phi_o = 1,15$ et $\phi_\ell = 0,18$, et par Hayashi et al. (1976) avec $\phi_o = 1,14$ et $\phi_\ell = 0,14$	88
Figure 3.22	Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0, et pour des prémélanges gazeux équivalents	90
Figure 3.23	Comparaison des résultats du modèle aux résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2007) avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,2$ et $\phi_o = 0,8$ et 1	91
Figure 3.24	Évolution de l'épaisseur de flamme en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0, et pour des prémélanges gazeux équivalents	92
Figure 3.25	Évolution de la richesse effective en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0	93
Figure 3.26	Évolution de la fraction molaire d'éthanol dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent.....	94
Figure 3.27	Évolution de la fraction molaire de dioxygène dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent.....	96
Figure 3.28	Évolution de la température dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent	97
Figure 3.29	Évolution du débit volumique de chaleur dégagée dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent.....	98
Figure 3.30	Évolution de la fraction molaire d'éthanol dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_\ell \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent.....	99
Figure 3.31	Évolution de la fraction molaire de dioxygène dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_\ell \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent.....	99

Figure 3.32	Évolution du débit volumique de chaleur dégagée dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_l \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent.....	100
Figure 3.33	Comparaison de la corrélation aux résultats numériques - S_L vs d_j	104

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

ESPÈCES CHIMIQUES

C	Atome de carbone
CO_2	Dioxyde de carbone
C_2H_5OH	Éthanol
H	Atome d'hydrogène
H_2O	Eau
N_2	Diazote
NO	Oxyde d'azote
O	Atome d'oxygène
OH	Hydroxyle
O_2	Dioxygène

UNITÉS DE BASE

bar	Bar (unité de pression)
K	Kelvin (unité calorifique)
kg	Kilogramme (unité de masse)
m	Mètre (unité de longueur)
mol	Mole (unité de quantité de matière)
N	Newton (unité de force)
Pa	Pascal (unité de pression)
Pl	Poiseuille (unité de viscosité dynamique)
s	Seconde (unité de temps)
W	Watt (unité de puissance)

SYMBOLES

Lettres latines

A_r	Constante de moyenne (= 1/3 ici)	-
B_M	Nombre de Spalding relatif aux transferts massiques	-
B_T	Nombre de Spalding relatif aux transferts calorifiques	-
C	Concentration molaire dans le mélange	mol.m^{-3}
C_D	Coefficient de trainée	-
c_p	Chaleur spécifique à pression constante	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
CURV	Paramètre de raffinement du maillage (courbure)	-
d	Diamètre des gouttes	m
D	Coefficient de diffusion	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
F	Fonction universelle	-
FA	Ratio carburant-air	-
F_D	Amplitude de la force de trainée	N
F_T	Facteur de correction relatif aux transferts massiques	-

F_M	Facteur de correction relatif aux transferts calorifiques	-
GRAD	Paramètre de raffinement de maillage (gradient)	-
h	Enthalpie spécifique	J.kg ⁻¹
J	Nombre de points du maillage	-
k	Conductivité thermique	W.m ⁻¹ .K ⁻¹
K	Nombre total d'espèces dans le système	-
Le	Nombre de Lewis	-
L_v	Chaleur latente spécifique de vaporisation au point d'ébullition	J.kg ⁻¹
$L(T_s)$	Chaleur latente spécifique de vaporisation à la température T_s	J.kg ⁻¹
m	Masse	kg
M	Ensemble des points du maillage	-
\dot{m}	Débit massique	kg.s ⁻¹
\dot{M}	Débit massique par unité de surface ou densité de flux massique	kg.s ⁻¹ .m ⁻²
n	Densité numérique de gouttes	m ⁻³
N	Nombre de moles dans le mélange	mol
Nu	Nombre de Nusselt	-
P	Pression	bar
Pr	Nombre de Prandtl	-
P_{sat}	Pression de vapeur saturante	bar
\dot{q}	Chaleur transférée à l'intérieur de la goutte (réchauffement)	J.s ⁻¹ ou W
r	Coordonnée radiale	m
R	Constante universelle des gaz parfaits	J.mol ⁻¹ .K ⁻¹
Re	Nombre de Reynolds	-
Sc	Nombre de Schmidt	-
S_e	Terme source d'énergie dans la phase gazeuse	W.m ⁻³
Sh	Nombre de Sherwood	-
S_L	Vitesse de flamme laminaire	m.s ⁻¹
S_m	Terme source de l'équation de conservation de la masse	kg.m ⁻³ .s ⁻¹
S_v	Terme source de moment dans la phase gazeuse	kg.m ⁻² .s ⁻²
t	Temps	s
T	Température	K
T_{crit}	Température critique	K
T_{ebull}	Température d'ébullition	K
u	Vecteur des inconnues du problème numérique	-
u, v, w	Composantes de la vitesse	m.s ⁻¹
V	Vitesse de diffusion	m.s ⁻¹
v_r	Vitesse relative des gouttes par rapport au gaz	m.s ⁻¹
W	Masse molaire	kg.mol ⁻¹
x, y	Coordonnées spatiales	m
X	Fraction molaire	-
Y	Fraction massique	-
\bar{y}	Direction de propagation de la flamme	-

Lettres grecques

α	Diffusivité thermique	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
β_1, β_2	Constantes de corrélation	-
δ_L	Épaisseur de flamme	m
δ_M, δ_T	Épaisseurs du film	m
Δy	Taille de maille	m
ϕ	Richesse	-
γ	Fraction volumique	-
λ	Concentration molaire en carburant	-
μ	Viscosité dynamique	Pl ou Pa.s
$\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_7$	Constantes utilisées dans la corrélation pour la vitesse de flamme gazeuse	-
$\theta'_1, \theta'_2, \dots, \theta'_6$	Constantes utilisées dans la corrélation pour la vitesse de flamme diphasique	-
ρ	Masse volumique	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
τ	Partie visqueuse du tenseur des contraintes	Pa
ω	Taux de production massique par unité de volume gazeux	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$
Ω	Fraction massique de vapeur de carburant	-
ψ	Exposant utilisé dans la corrélation pour la vitesse de flamme gazeuse	-

Indices

<i>a</i>	Air
<i>b</i>	Gaz brûlés (« burnt », en anglais)
<i>c</i>	Grandeurs corrigées (prenant en compte la conduction)
<i>d</i>	Goutte (« droplet », en anglais)
<i>diph</i>	Flamme diphasique
<i>eff</i>	Effective
<i>f</i>	Carburant (« fuel », en anglais)
<i>F</i>	Vapeur des espèces de la phase liquide
<i>g</i>	Phase gazeuse
<i>gaz</i>	Flamme gazeuse
<i>i</i>	Initial
<i>j</i>	j-ième point du maillage
<i>k</i>	k-ième espèce pure et gazeuse
<i>l</i>	Phase liquide
<i>max</i>	Maximum
<i>o</i>	Total (« overall », en anglais)
<i>ref</i>	Quantités de référence
<i>s</i>	Surface de la goutte
<i>st</i>	Stœchiométrie
<i>u</i>	Gaz frais (« unburnt », en anglais)

XXIV

0 Point d'ancrage de la flamme
 ∞ Extérieur du film (environnement ambiant)

Exposants

max Valeur à laquelle le maximum est atteint
 p Pas de temps
* Avant correction (sans prise en compte de la conduction)

Accentuation

— Grandeurs moyennées dans le film entourant la goutte

INTRODUCTION

Ces dernières années, l'adoption de normes plus sévères en matière de protection de l'environnement oblige les motoristes à améliorer leurs systèmes. En aéronautique et en automobile, des bancs d'essais sont ainsi mis en place pour tester les moteurs. Cette approche expérimentale permet notamment la quantification des émissions polluantes et l'établissement de stratégies d'optimisation des moteurs. Ces essais sont cependant compliqués à mettre en place et ont un coût élevé. La modélisation numérique des moteurs s'avère être un bon complément aux recherches expérimentales. Elle permet d'obtenir plus rapidement et à moindre coût les résultats attendus.

Les conclusions de la littérature indiquent d'ailleurs que la combustion et le mélange du carburant sont des étapes cruciales s'agissant des problèmes d'optimisation des moteurs à combustion interne. Baumgarten (2006) explique d'ailleurs que les émissions polluantes sont directement liées à ces processus. En effet, lors de l'injection du carburant, une fraction des gouttes reste sous forme liquide et interagit avec la flamme, ce qui peut provoquer un changement de sa structure et un ralentissement ou une accélération de sa propagation. Cet effet se retrouve dans toutes les chambres de combustion de machines thermiques fonctionnant avec des carburants liquides. Il existe aujourd'hui plusieurs types de modèles numériques. Les plus complexes permettent de modéliser avec précision les chambres de combustion mais demandent d'importants temps de calcul et requièrent des données telles que la vitesse de flamme (notion définie dans le chapitre 1). Pour obtenir numériquement ces données, un modèle simplifié (comme celui de cette étude) est souvent utilisé. De nombreuses études ont été menées dans ce domaine, mais très peu d'études numériques ont concerné l'éthanol. Étant donné l'intérêt croissant des industries pour ce biocarburant, il nous a semblé important de centrer notre recherche sur ce dernier et d'essayer de combler les lacunes de la littérature. L'application industrielle à long terme de cette étude pourrait notamment permettre l'amélioration des systèmes d'injection et la réduction des émissions polluantes.

Ce projet s'inscrit ainsi dans un contexte de recherches fondamentales. Son objectif principal est d'évaluer numériquement l'influence des gouttes d'éthanol sur la propagation d'une flamme laminaire prémélangée. Pour atteindre cet objectif, un modèle numérique monodimensionnel a été utilisé et défini sous le logiciel « COSILAB ». L'étude de la vitesse de flamme, de sa structure et de l'état d'évaporation des gouttes selon les conditions étudiées permettra de caractériser la propagation de la flamme.

Dans cette étude, les analyses ont été menées pour des flammes laminaires et monodimensionnelles d'éthanol dans un environnement à 300 K. Plusieurs paramètres physiques ont varié afin de recréer différents environnements de propagation :

- la richesse totale du milieu,
- sa richesse liquide,
- le diamètre initial des gouttes (supposées sphériques),
- la pression des gaz frais.

Le premier chapitre de ce mémoire sera dédié à la revue de la littérature. Les principaux résultats expérimentaux et numériques seront présentés. Ce chapitre permettra aussi de définir les notions de base utilisées dans ce type de recherche et de préciser les sous-objectifs visés au cours de cette étude. Le second chapitre détaillera le socle théorique du modèle et explicitera les hypothèses réductrices qui ont dû être émises. Dans ce chapitre, la définition et la validation du modèle seront abordées, les paramètres numériques et la procédure de paramétrage seront notamment précisés. Le dernier chapitre développera les résultats numériques. En fin de chapitre, des corrélations seront aussi proposées.

Ce mémoire sera conclu par un rappel des résultats significatifs et des observations importantes. Quelques recommandations seront aussi proposées pour d'éventuels travaux futurs sur ce sujet.

CHAPITRE 1

REVUE DE LA LITTÉRATURE

1.1 Introduction

La combustion de gouttes concerne de nombreux domaines. Dans les turbines à gaz, moteurs automobiles et chaufferies, par exemple, la propagation de flammes s'effectue en milieu diphasique. La compréhension et la prédiction des phénomènes physiques mis en jeu sont donc cruciales. C'est pour cette raison que de nombreuses études ont été menées sur la combustion de sprays et sur les mécanismes physiques associés (l'atomisation et l'évaporation des gouttes notamment).

Dans ce chapitre, un bilan général de l'avancement des recherches sur cette problématique sera dressé. La première section consistera en un rapide rappel sur les flammes laminaires et sur la combustion de prémélanges gazeux. Cette partie constituera les bases nécessaires à la réflexion engagée. La section suivante sera consacrée à la combustion en milieu diphasique. Les différentes tendances (tirées de la littérature) seront présentées et comparées. L'influence de plusieurs paramètres physiques sera analysée : richesse totale, richesse liquide, diamètre initial des gouttes et pression du mélange frais. Les grandeurs spécifiques des mélanges diphasiques (utilisées dans les différents articles abordés) seront précisées.

1.2 Flammes laminaires de prémélange

Avant d'aborder le problème complexe de combustion en milieu diphasique, il est important de poser les bases en rappelant les résultats obtenus pour la combustion de prémélanges gazeux. La comparaison des flammes diphasiques aux flammes gazeuses* (dans les mêmes

* Par abus de langage, les flammes se propageant dans des prémélanges gazeux seront appelées « flammes gazeuses » et celles se propageant dans des prémélanges gazeux contenant des gouttes de carburant (prémélanges diphasiques) seront appelées « flammes diphasiques ».

conditions) est en effet fortement instructive, comme l'explique Hayashi et Kumagai (1975). Elle permet de comprendre et de quantifier l'effet des gouttes sur la propagation de la flamme. Dans cette première partie, un rapide rappel théorique sur les flammes laminaires de prémélange sera effectué. Les définitions des grandeurs et notions de base seront rappelées.

1.2.1 Définitions et notions de base

Dans le cas des flammes de prémélange, le comburant et le combustible arrivent mélangés puis sont allumés. Les applications les plus connues de ce type de flamme sont le bec Bunsen et le moteur à allumage commandé (ou moteur essence, dans lequel l'allumage se fait au moyen de bougies). Ce type de flammes est le siège de nombreux phénomènes physiques en perpétuelle interaction. On peut citer notamment les transferts de masse et de chaleur, la thermochimie et la thermodynamique. Ce mélange des disciplines fait toute la complexité des problèmes de combustion.

Dans une flamme, ce que l'on appelle le « front de flamme » correspond à la mince zone qui sépare les gaz frais des gaz brûlés (cf. Figure 1.1). La progression du front de flamme se fait de proche en proche en direction des gaz frais. Ainsi, les gaz frais sont chauffés par diffusion thermique au front de flamme. Dès qu'ils atteignent la température critique d'auto-inflammation, ils s'enflamment et deviennent le siège de réactions globalement exothermiques. Dans le cas des flammes laminaires, la vitesse de consommation des gaz frais par le front de flamme, appelée vitesse de propagation laminaire ou vitesse de flamme laminaire (S_L) est une caractéristique très importante. Elle dépend de nombreux paramètres tels que la nature du mélange (carburant, richesse), la pression et la température des gaz frais,... L'étude actuelle se concentrera donc en particulier sur cette grandeur.

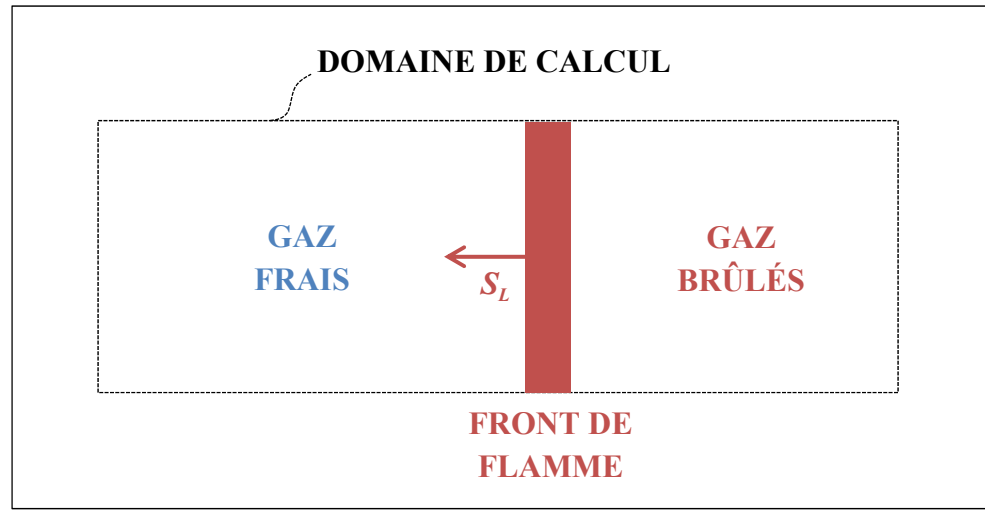


Figure 1.1 Schéma illustrant la propagation d'une flamme

1.2.2 Tendances générales

Comme mentionné ci-dessus, S_L dépend de plusieurs paramètres. De multiples études expérimentales (et numériques) ont été menées pour quantifier l'impact de ces différents paramètres. Comme l'a remarqué Broustail (2012), il existe une certaine disparité des résultats. Celle-ci semble due au fait que les méthodes expérimentales utilisées dans les différentes études sur le sujet n'étaient pas les mêmes et que les incertitudes de mesure demeuraient la plupart du temps élevées. Cependant, les tendances générales restent les mêmes. Ces dernières sont résumées dans la suite :

Influence de la richesse

La première influence est celle de la richesse du mélange (ϕ). Ce paramètre, très important en combustion, s'exprime comme suit :

$$\phi = \frac{m_f / m_a}{(m_f / m_a)_{st}} \quad (1.1)$$

Avec m_f la masse de carburant dans le mélange réactif et m_a la masse d'air. Au dénominateur, l'indice st est utilisé pour représenter les grandeurs à la stœchiométrie. Rappelons qu'une combustion est dite stœchiométrique si la quantité molaire d'air dans le mélange permet la combustion complète d'une mole de carburant. Ces quantités se calculent grâce à un bilan atomique (cf. l'ANNEXE VI). Pour la suite, on adoptera la notation suivante :

$$FA_{st} = \left(\frac{m_f}{m_a} \right)_{st}, \text{ le ratio massique carburant-air à la stœchiométrie.}$$

Concernant l'influence de ϕ sur la propagation de la flamme, le premier constat qui peut être fait est que S_L augmente, atteint un maximum puis diminue lorsque ϕ augmente. Cette courbe en forme de parabole inversée (ou de \cap) est typique de l'évolution de S_L en fonction de ϕ . Pour illustrer cette tendance, les courbes expérimentales obtenues dans la littérature et pour de l'éthanol (Broustail, 2012; Egolfopoulos, Du et Law, 1992) ont été rassemblées sur la Figure 1.2.

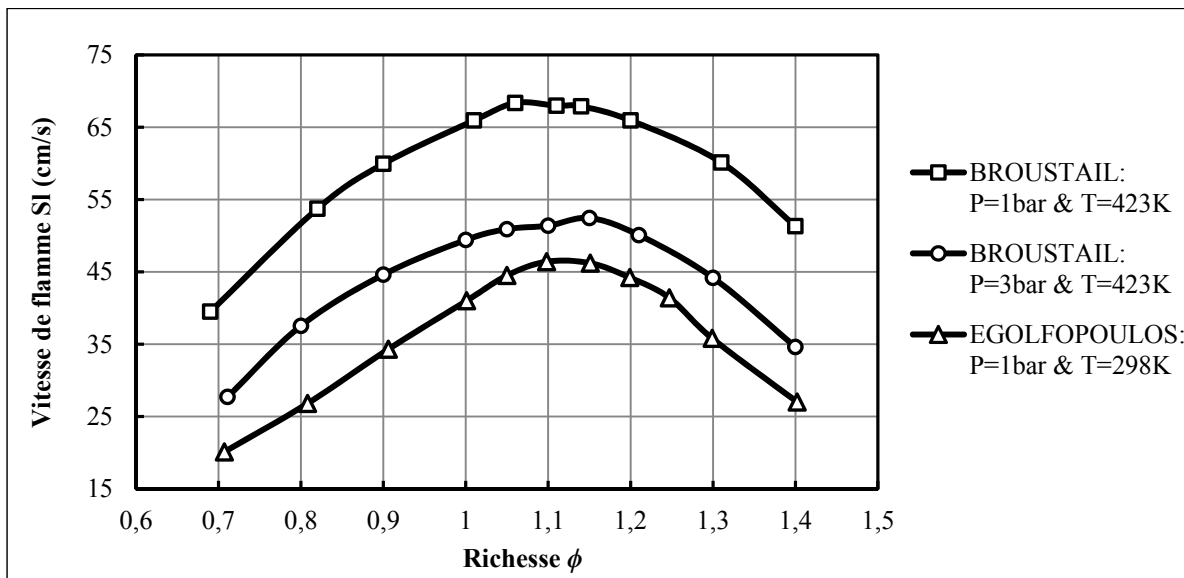


Figure 1.2 Évolution de la vitesse de flamme S_L en fonction de la richesse ϕ du mélange gazeux pour de l'éthanol et à différentes conditions : $P = 1 \text{ bar} \ \& \ T = 423 \text{ K}$ (Broustail, 2012); $P = 3 \text{ bar} \ \& \ T = 423 \text{ K}$ (Broustail, 2012); $P = 1 \text{ bar} \ \& \ T = 298 \text{ K}$ (Egolfopoulos et al., 1992)

Comme on peut le voir sur la Figure 1.2, la vitesse maximale ($S_{L,max}$) est atteinte pour un mélange légèrement riche en carburant (soit $\phi \approx 1,1$). À cette richesse, le mélange réagit donc plus intensivement. Si le mélange est trop riche ou trop pauvre, il est impossible d'obtenir une propagation de flamme : c'est ce que l'on appelle les limites d'inflammabilité inférieure et supérieure du carburant. Sur la Figure 1.2, il est ensuite intéressant de noter que, pour un même carburant, la richesse à laquelle $S_{L,max}$ est atteinte ne change pas lorsque la température et la pression du mélange initial varient. Précisons aussi que les tendances obtenues pour l'éthanol auraient été similaires pour d'autres carburants. L'éthanol a simplement été choisi ici comme exemple.

Influence de la pression et de la température des gaz frais

Passons maintenant à l'influence de la pression et de la température des gaz frais. Dans son livre, Kuo (1986) explique que l'augmentation de la pression des gaz frais, notée P_u , entraîne une baisse de S_L pour les carburants (dont l'éthanol) vérifiant : $S_L < 50$ cm/s sous conditions standards (i.e. à 298 K et 1 bar). Dans sa thèse, Broustail (2012) ajoute qu'à certaines richesses, l'augmentation de P_u peut aussi changer la forme du front de flamme. L'augmentation de la température des gaz frais (T_u), quant à elle, entraîne une forte augmentation de S_L . Comme pour P_u , cette évolution n'est pas linéaire et peut être calculée approximativement grâce à des corrélations empiriques. La sensibilité de S_L vis-à-vis de P_u et de T_u varie d'une corrélation à l'autre, mais les ordres de grandeur restent les mêmes. Pour de l'éthanol, Liao et al. (2007) expliquent, par exemple, que la vitesse de flamme est proportionnelle à :

$$\left(\frac{T_u}{T_{ref}} \right)^{\beta_1} \left(\frac{P_u}{P_{ref}} \right)^{\beta_2} \quad (1.2)$$

avec T_{ref} et P_{ref} les conditions de référence fixées à 300 K et 1 bar.

Dans cette corrélation, β_1 et β_2 dépendent de ϕ et sont respectivement compris dans les intervalles suivants : de 1,6 à 1,9 et de -0,2 à -0,17.

1.3 Mélanges diphasiques

Les bases maintenant posées, il est temps de s'intéresser au cœur du problème : la combustion en présence de gouttes. Une première partie viendra préciser les définitions et notations utilisées dans la littérature pour décrire des milieux diphasiques. Par la suite, les résultats collectés dans des études expérimentales et théoriques seront présentés. Les analyses s'attarderont surtout sur des articles étudiant l'éthanol puisque ce carburant est au cœur de cette étude, mais des résultats obtenus pour d'autres carburants (isooctane, diesel, ...) seront aussi étudiés pour multiplier les sources de comparaison.

1.3.1 Quelques définitions et notations

Dans les diverses études collectées dans la littérature, les gouttes sont considérées comme des sphères dont le diamètre est noté d (et le diamètre initial d_i). Les autres paramètres caractérisant les mélanges diphasiques dans leur état initial sont la richesse totale, liquide et gazeuse du mélange. Celles-ci sont définies comme suit :

$$\begin{cases} \phi_o = \frac{m_{f,o}/m_a}{FA_{st}} \\ \phi_\ell = \frac{m_{f,\ell}/m_a}{FA_{st}} \\ \phi_g = \phi_o - \phi_\ell \end{cases} \quad (1.3)$$

Avec :

- $m_{f,o}$ la masse totale de carburant (quelle que soit sa phase);
- $m_{f,\ell}$ la masse de carburant liquide dans le mélange;
- m_a la masse d'air dans le mélange.

Dans la littérature, les auteurs utilisent des paramètres d'étude assez différents, et pourtant interconnectés. Afin de pouvoir comparer les articles, il a donc été très important de dégager les liens entre ces paramètres et d'en comprendre les définitions. L'ANNEXE I précisera

ainsi les équivalences entre les notations de la littérature. Notons tout de même que les notations utilisées dans l'étude actuelle correspondent à celles de Nomura et al. (2000; 2007). Dans les sections suivantes, de nombreuses tendances seront examinées. Le Tableau 1.1 fait la liste de celles qui seront abordées.

Tableau 1.1 Liste des tendances étudiées dans la littérature

	Paramètre variable secondaire	Paramètres fixés ⁱ		
S_L vs Richesse totale (ϕ_o)	ϕ_ℓ	d_i	P_u	Cf. section 1.3.2
	d_i	ϕ_ℓ	P_u	
	P_u	ϕ_ℓ	d_i	
S_L vs Richesse liquide (ϕ_ℓ)	d_i	$\phi_o(< 1)$	P_u	Cf. section 1.3.3
	d_i	$\phi_o(> 1)$	P_u	
	P_u	ϕ_o	d_i	
S_L vs Diamètre initial des gouttes (d_i)	ϕ_ℓ	$\phi_o(< 1)$	P_u	Cf. section 1.3.4
	ϕ_ℓ	$\phi_o(> 1)$	P_u	
S_L vs Pression des gaz frais (P_u)	ϕ_o	ϕ_ℓ	d_i	Cf. section 1.3.5

ⁱ Même si P_u n'est pas précisée dans certaines études, elle sera considérée comme un paramètre fixe lors de l'analyse.

1.3.2 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale

La tendance générale de la courbe représentant l'évolution de S_L en fonction de ϕ_o est identique pour une flamme de prémélange gazeux et une flamme diphasique (cf. Figure 1.3). En effet, la vitesse de flamme des mélanges diphasiques ($S_{L,diph}$)[†] augmente avec ϕ_o , atteint un maximum puis diminue. Ce résultat a notamment été obtenu dans les quatre études expérimentales sur l'éthanol : Hayashi et al. (1975; 1976) ; Nomura et al. (2000; 2007). Ces deux groupes de recherche sont néanmoins en désaccord sur un point : la richesse à laquelle $S_{L,max}$ est atteinte (qui sera notée ϕ_o^{max} pour la suite). Hayashi et al. ont trouvé que ce maximum est atteint pour des mélanges globalement riches alors que pour Nomura et al. un tel maximum est obtenu pour des mélanges pauvres. Ce constat avère la disparité des résultats expérimentaux.

Même si les deux groupes de recherche utilisent la technique de génération de gouttes par condensation, il est important de noter que les protocoles expérimentaux ne sont pas exactement les mêmes :

- Pour Hayashi et al., la condensation du carburant liquide se fait via le déplacement d'un piston dans lequel l'air a été mélangé à une certaine quantité de carburant gazeux.
- Pour Nomura et al., la rapide réduction de pression menant à l'apparition de gouttelettes est contrôlée par un système de valves et de capteurs de pression.

Cette différence pourrait expliquer en partie les différences entre les résultats expérimentaux. Notons que d'autres méthodes expérimentales sont utilisées dans la littérature : Myers et Lefebvre (1986) utilisent, par exemple, plusieurs atomiseurs pour générer les gouttes. Saat (2010) consacre toute une partie de sa thèse à l'analyse des méthodes de génération de gouttes. Il y explique notamment que le principal avantage de la technique par condensation (utilisée par Hayashi et al., et Nomura et al.) est la faible dispersion de la taille de gouttes. Les mélanges diphasiques obtenus peuvent être considérés comme uniformes, mais il précise

[†] L'indice *diph* permet de différencier les grandeurs obtenues pour des mélanges diphasiques de celles obtenues pour des prémélanges gazeux (qui seront notées avec l'indice *gaz* : $S_{L,gaz}$).

aussi que cette méthode ne convient pas pour de hautes pressions initiales et que la mise en place du montage expérimental reste difficile.

Les résultats collectés dans la littérature ont ensuite révélé que l'évolution de S_L en fonction de ϕ_o varie plus ou moins selon la valeur des paramètres secondaires : ϕ_ℓ , d_i ou P_u . Cet impact sera étudié dans les prochaines parties.

Influence de la richesse liquide

Dans leur étude, Hayashi et Kumagai (1975) se sont tout d'abord attardés sur l'influence de ϕ_ℓ . Les conditions expérimentales n'étant pas détaillées dans cette étude (conditions de température et de pression des gaz frais non précisées), il nous a semblé intéressant de nous ramener à des tendances adimensionnelles. Pour ce faire, les vitesses de flamme obtenues par Hayashi et Kumagai (1975) ont été divisées par la vitesse de flamme maximale, obtenue pour un prémélange gazeux à $\phi \approx 1,1$. Sur la Figure 1.3, les courbes obtenues pour des prémélanges gazeux ont ainsi été superposées à celles des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,04 et 0,14 et d_i entre 4 et 7 μm .

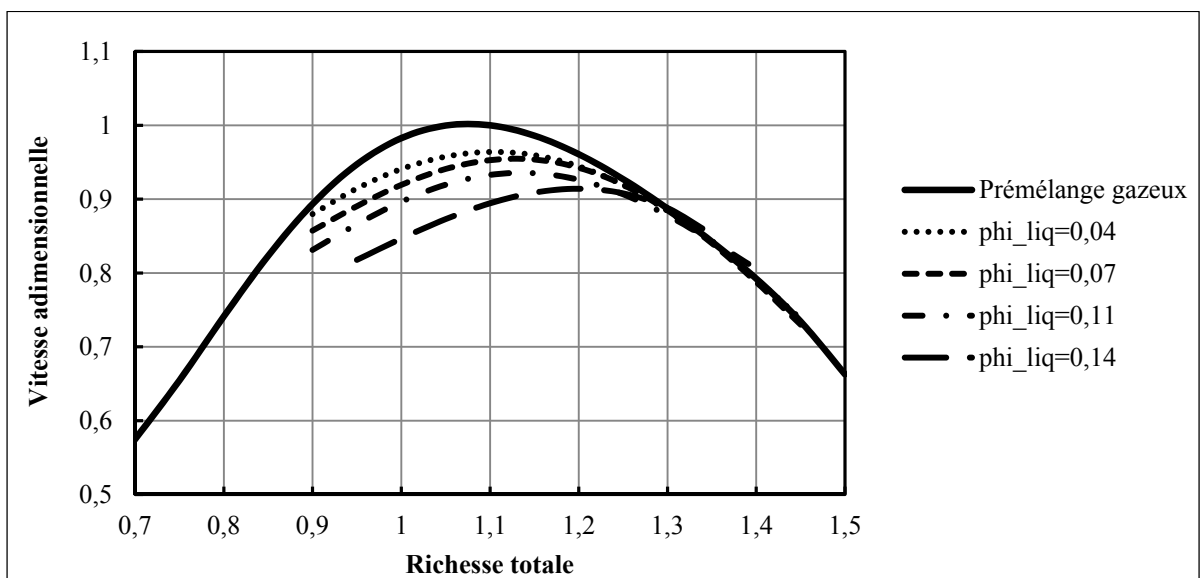


Figure 1.3 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,04 et 0,14 et d_i entre 4 et 7 μm , et pour des prémélanges gazeux - Données tirées de Hayashi et al. (1975)

La Figure 1.3 révèle une translation des courbes : pour des petites gouttes, l'augmentation de ϕ_ℓ entraîne une diminution de $S_{L,max}$ et une augmentation de ϕ_o^{max} . L'influence des gouttes est plus prononcée sur les mélanges proches de la stœchiométrie (ϕ_o entre 1 et 1,1). À ces richesses, les mélanges brûlent plus vite. Même les petites gouttes n'ont donc pas le temps de s'évaporer complètement à l'avant du front de flamme. Sur la Figure 1.3, on constate aussi que la vitesse de flamme des mélanges diphasiques reste inférieure à celle des prémélanges gazeux équivalents[‡] sauf pour $\phi_o > 1,3$.

Hayashi, Kumagai et Sakai (1976) ont ensuite étendu les recherches à de plus grosses gouttes et se sont intéressés à l'influence de d_i . Les données tirées de cet article ont été adimensionnées de la même façon que précédemment et rassemblées sur la Figure 1.4. Cette figure présente les tendances obtenues pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,21 et d_i entre 4 et 30 μm , ainsi que celle obtenue pour des prémélanges gazeux.

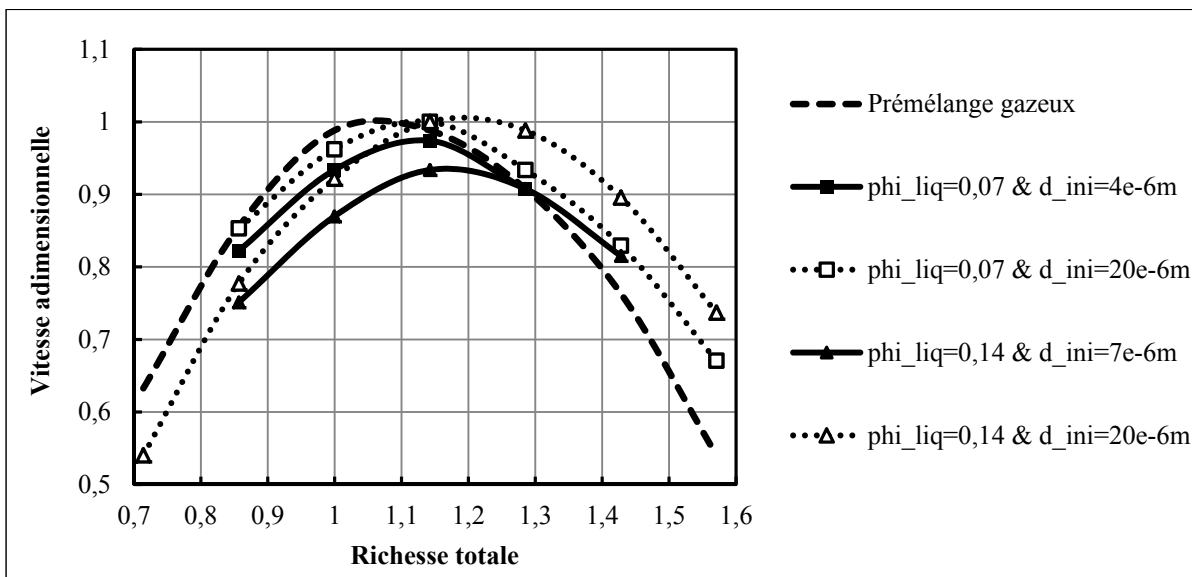


Figure 1.4 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,14 et d_i entre 4 et 20 μm , et pour des prémélanges gazeux - Données tirées de Hayashi et al. (1976)

[‡] Un prémélange gazeux est dit « équivalent » à un mélange diphasique si sa richesse est égale à la richesse totale du mélange diphasique auquel il est comparé. La température et la pression doivent aussi être identiques.

La Figure 1.4 montre que pour des gouttes de 20 μm de diamètre (courbes en pointillés et dont les marqueurs sont blancs), l'augmentation de ϕ_ℓ provoque une augmentation de ϕ_o^{max} mais change peu $S_{L,max}$. Cette évolution diffère de celle constatée pour des petites gouttes (cf Figure 1.3). Il semblerait donc qu'au-delà d'un certain diamètre les tendances changent. Comme l'expliquent Hayashi, Kumagai et Sakai, la présence de grosses gouttes induit une déformation du front de flamme, ce qui pourrait expliquer le changement de tendance.

Pour les grosses gouttes, on constate aussi que la vitesse de flamme des mélanges diphasiques reste inférieure à celle du prémélange gazeux équivalent pour $\phi_o < 1,1$. Pour des ϕ_o plus élevées, c'est le contraire. Dans leur étude, Ballal et Lefebvre (1981) ont étudié des carburants lourds tels que l'isooctane et le diesel, et pour ces carburants aussi $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$ quand $\phi_o \leq 1$.

Influence du diamètre des gouttes

Considérant les premières remarques évoquées ci-dessus, il semblerait que d_i ait une influence sur la propagation du front de flamme. D'après Hayashi, Kumagai et Sakai (1976), $S_{L,max}$ augmente quand d_i augmente alors que ϕ_o^{max} ne change pas. Cette supériorité est avérée sur la Figure 1.4, lorsque l'on compare les courbes ayant des marqueurs de forme carrée à celles ayant des marqueurs triangulaires. Notons aussi que l'augmentation de $S_{L,max}$ est plus marquée à $\phi_\ell = 0,14$ qu'à $\phi_\ell = 0,07$.

Pour des richesses liquides élevées ($\phi_\ell = 0,3$), Nomura et al. (2000) n'arrivent pas aux mêmes constatations. Tout comme avec Hayashi et al. (1975; 1976), Nomura et al. (2007; 2000) ne détaillent pas complètement les conditions expérimentales. Ils précisent la pression, mais ne donnent qu'un intervalle de variation pour la température initiale (entre 288,4 et 344,8 K). Kuo (1986) explique pourtant que la vitesse de flamme varie significativement avec la température initiale du mélange. Sur un tel intervalle de température, la vitesse de flamme peut varier de près de 40%. La Figure 1.5 présente les résultats adimensionnels obtenus pour des prémélanges gazeux ainsi que ceux obtenus pour des mélanges diphasiques avec $\phi_\ell = 0,3$ et d_i entre 7,5 et 11 μm .

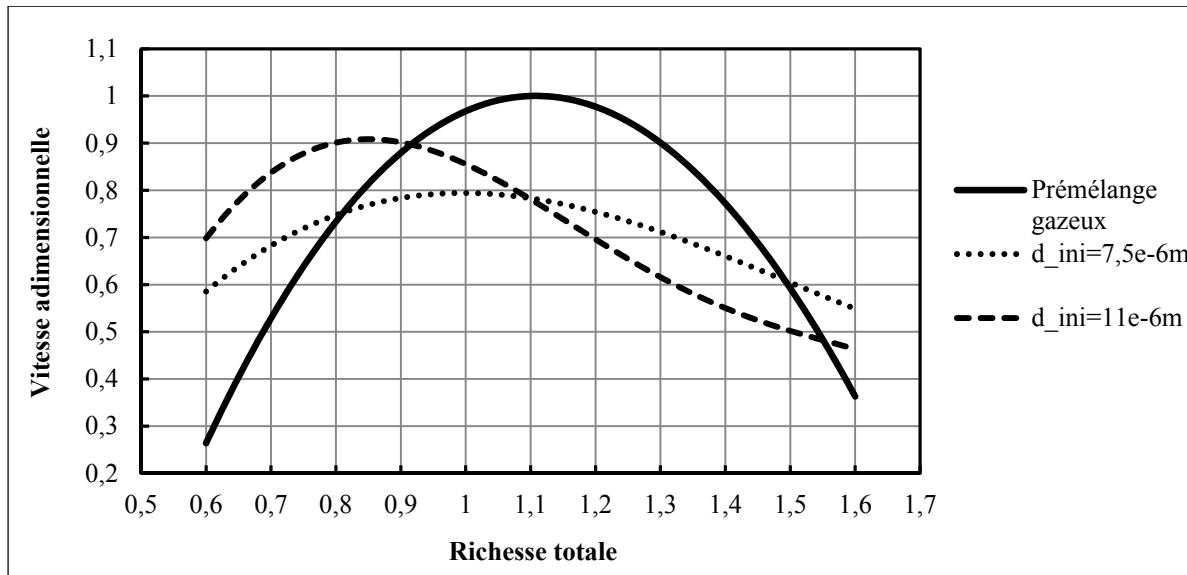


Figure 1.5 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o à $P_u = 2$ bar pour des mélanges diphasiques avec $\phi_\ell = 0,3$ et d_i entre 7,5 et 11 μm , et pour des prémélanges gazeux - Données tirées de Nomura et al. (2000; p.1001).

Sur la Figure 1.5, l'augmentation de d_i entraîne une augmentation de $S_{L,max}$ et une diminution de ϕ_o^{max} . Cette tendance ne concorde pas avec ce qui avait été constaté sur la Figure 1.4. Cette différence peut soit signifier qu'à partir d'une certaine richesse liquide les tendances s'inversent, soit révéler une nouvelle contradiction dans les résultats. Il est difficile de trancher puisqu'aucune autre étude ne s'est intéressée à ce cas précis.

Influence de la pression des gaz frais

Dans les études précédentes, les paramètres liés au carburant ont été largement exploités alors que d'autres paramètres tels que P_u n'ont pas été étudiés. L'étude présentée par Nomura et al. (2007) pallie ce manque. Après une première recherche (2000) réalisée avec une pression fixée à 2 bar, cette nouvelle étude a tenté de clarifier les effets de la pression sur la propagation des flammes dans les milieux diphasiques en la faisant varier de 2 à 10 bar. La Figure 1.6 rassemble ainsi les tendances adimensionnelles obtenues dans le cadre de cette recherche. Ici, la vitesse adimensionnelle a été obtenue en divisant les vitesses de flamme par la vitesse maximale mesurée pour une flamme gazeuse à $\phi \approx 1$ et $P_u = 2$ bar.

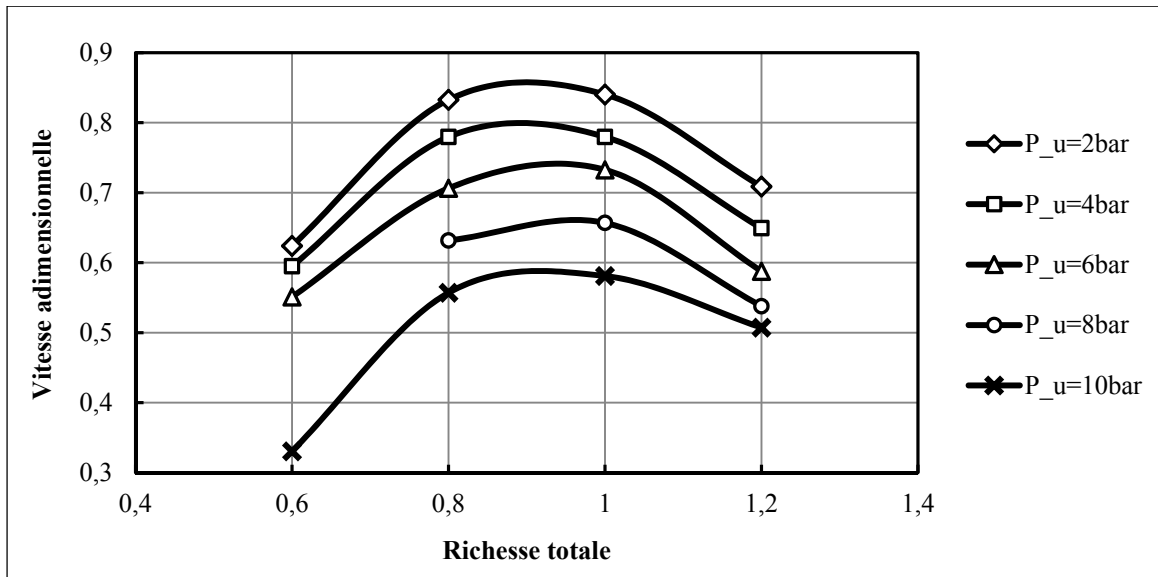


Figure 1.6 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec P_u entre 2 et 10 bar, $\phi_\ell = 0,2$ et $d_i = 8,5 \mu\text{m}$ - Données tirées de Nomura et al. (2007; p.2136 et 2137)

La Figure 1.6 révèle que l'augmentation de P_u entraîne la diminution de $S_{L,max}$ mais ne change pas ϕ_o^{max} (qui reste inférieure à 1 dans l'étude de Nomura et al. (2007))

Bilan

Le Tableau 1.2 fait un résumé complet des tendances décrites précédemment pour S_L vs ϕ_o et met en avant les contradictions notées dans la littérature.

Tableau 1.2 Récapitulatif des tendances de la littérature - S_L vs ϕ_o

	Conditions	Tendances S_L vs ϕ_o	Remarques
Tendance générale		$S_L \nearrow$ puis \searrow quand $\phi_o \nearrow$	
		$\phi_o^{max} > 1$ → Hayashi et al. $\phi_o^{max} < 1$ → Nomura et al.	<u>CONTRADICTION</u>
Variations de ϕ_ℓ	$\phi_\ell \leq 0,14$; $d_i = 4$ à $7 \mu\text{m}$ → Hayashi et al. (1975)	$S_{L,max} \searrow$ et $\phi_o^{max} \nearrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$ Pour $\phi_o < 1,3$: $S_{L,diph} < S_{L,gaz}$ Pour $\phi_o > 1,3$: $S_{L,diph} > S_{L,gaz}$	Influence marquée autour de la stœchiométrie
	$\phi_\ell \leq 0,14$; $d_i = 20 \mu\text{m}$ → Hayashi et al. (1976)	$S_{L,max}$ varie peu et $\phi_o^{max} \nearrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$ Pour $\phi_\ell = 0,14$: $S_{L,diph} > S_{L,gaz}$	Différente de celle obtenue pour $d_i = 4$ à $7 \mu\text{m}$
		Pour $\phi_o < 1,1$: $S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	En accord avec Ballal et Lefebvre (1981)
		Pour $\phi_o > 1,1$: $S_{L,diph} > S_{L,gaz}$	
Variations de d_i	$d_i = 4$ à $20 \mu\text{m}$; $\phi_\ell \leq 0,14$ → Hayashi et al. (1976)	$S_{L,max} \nearrow$ quand $d_i \nearrow$	ϕ_o^{max} ne change pas
	$d_i = 7,5$ à $11 \mu\text{m}$; $\phi_\ell = 0,3$ → Nomura et al. (2000)	$S_{L,max} \nearrow$ et $\phi_o^{max} \searrow$ quand $d_i \nearrow$	
Variations de P_u	P_u entre 2 et 10 bar; $d_i = 8,5 \mu\text{m}$; $\phi_\ell = 0,2$ → Nomura et al. (2007)	$S_{L,max}$ quand $P_u \nearrow$	ϕ_o^{max} ne change pas et reste inférieur à 1

1.3.3 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse liquide

Comme expliqué précédemment, la vitesse de flamme des mélanges diphasiques dépend de la richesse liquide. Pour étudier en détails l'influence de ce paramètre, l'évolution de S_L en fonction de ϕ_ℓ sera tracée pour différentes conditions de mélange.

Mélanges diphasiques globalement pauvres

Les résultats de Nomura et al. (2000) pour des mélanges diphasiques pauvres ($\phi_o = 0,8$) avec d_i entre 7,5 et 40 μm ont été rassemblés sur la Figure 1.7. Cette fois, les vitesses adimensionnelles ont été obtenues en divisant la vitesse des flammes diphasiques par la vitesse de flamme du mélange gazeux équivalent.

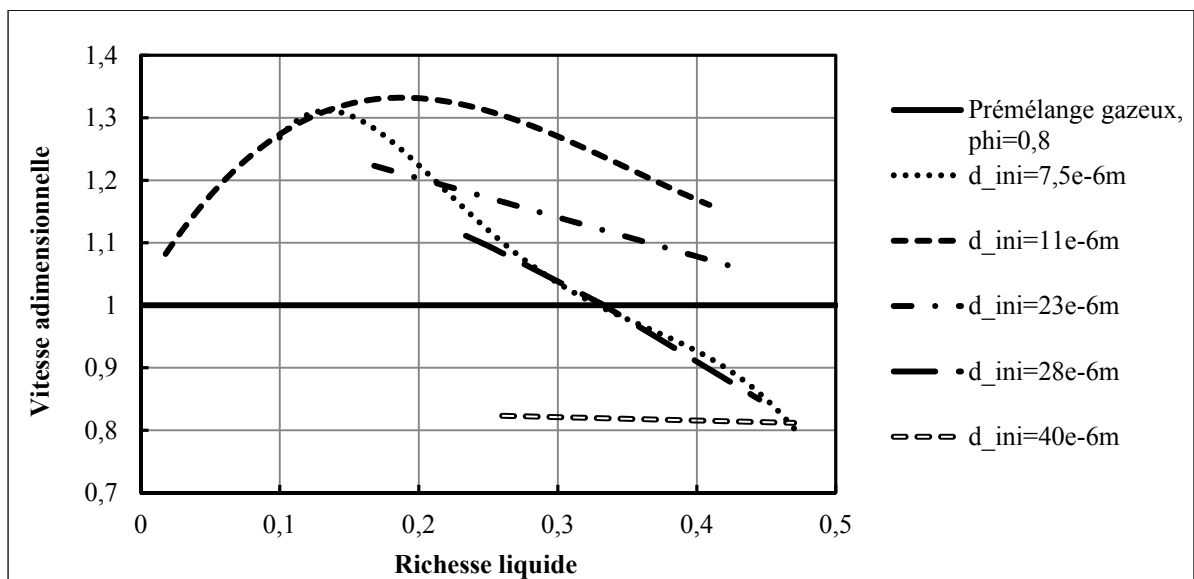


Figure 1.7 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ à $P_u = 2$ bar pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 7,5 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent - Données tirées de Nomura et al. (2000)

La Figure 1.7, révèle que pour $d_i \leq 11 \mu\text{m}$, l'augmentation de ϕ_ℓ induit une tendance en forme de parabole inversée. En effet, pour de faibles ϕ_ℓ , S_L tend à augmenter quand ϕ_ℓ augmente alors que pour des ϕ_ℓ élevées S_L décroît. La décroissance observée pour d'importantes richesses liquides se retrouve aussi pour des grosses gouttes. À ce point il est intéressant de

comparer les résultats collectés dans la littérature. La Figure 1.8 rassemble ainsi les tendances obtenues par Hayashi, Kumagai et Sakai (1976) et Nomura et al. (2000) pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 20 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,15$.

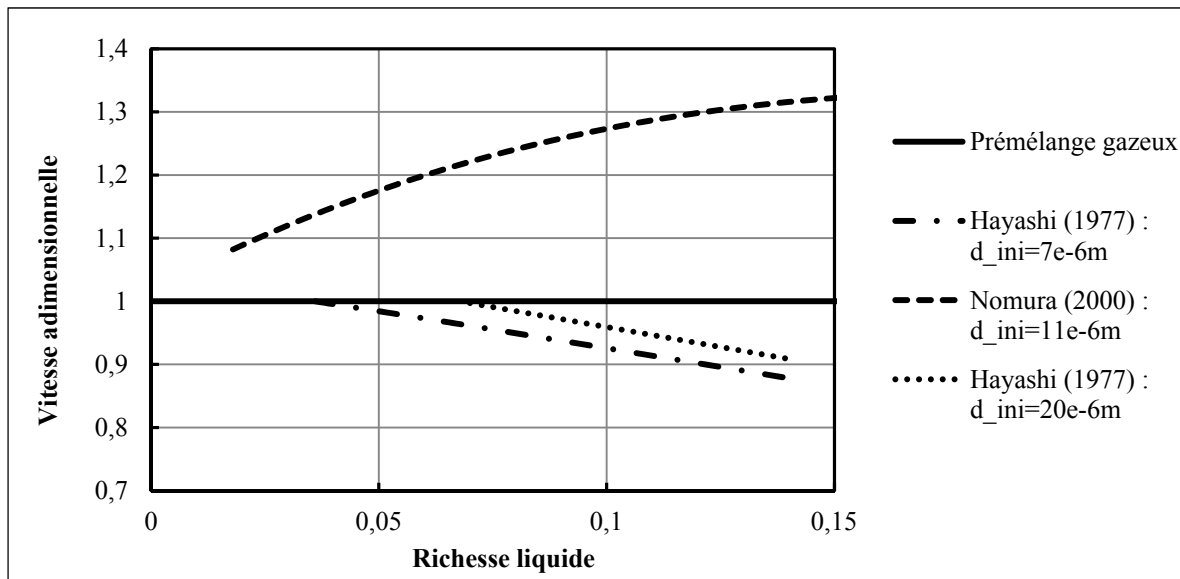


Figure 1.8 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) à ceux d'Hayashi et al. (1976) avec $d_i \leq 20 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,15$

La Figure 1.8 révèle que les résultats des deux groupes de recherche ne concordent pas. Hayashi, Kumagai et Sakai (1976) obtiennent une diminution de S_L qu'ils attribuent à l'hétérogénéité de la concentration de la vapeur de carburant. Nomura et al. (2000) quant à eux obtiennent la tendance contraire. Même si les diamètres de gouttes sont différents d'une courbe à l'autre, la comparaison des tendances a semblé intéressante puisque les conditions expérimentales restent relativement proches.

Comparons maintenant les tendances obtenues pour de plus grosses gouttes. La Figure 1.9 rassemble les tendances obtenues par Nomura et al. (2000) et Ballal et Lefebvre (1981) pour des mélanges diphasiques pauvres.

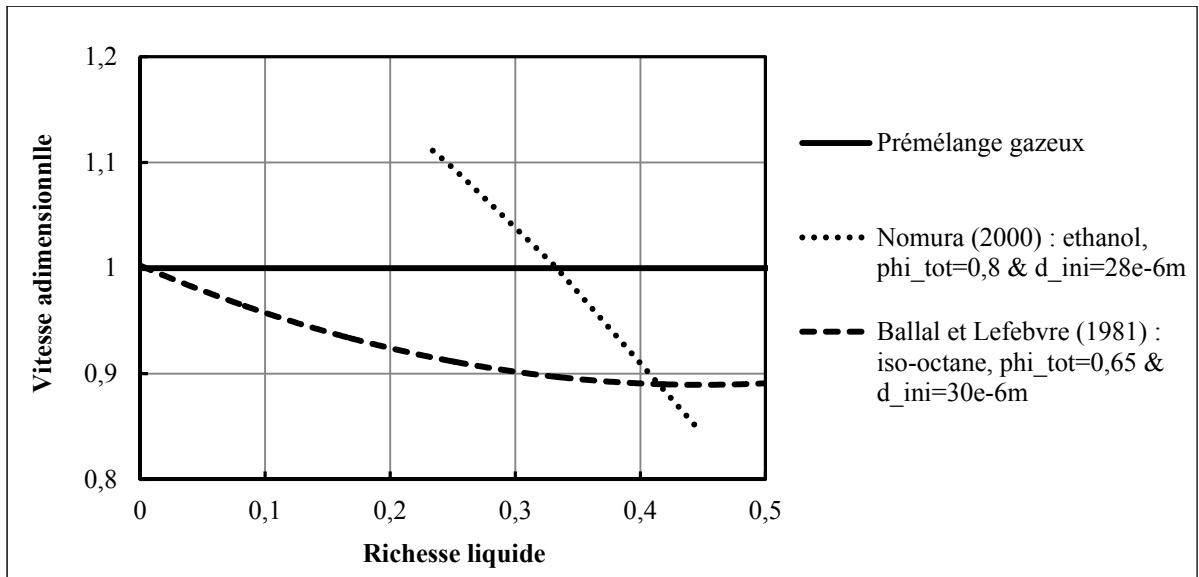


Figure 1.9 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) pour de l'éthanol et avec $\phi_o = 0,8$ et $d_i = 30 \mu\text{m}$, à ceux de Ballal et Lefebvre (1981) pour de l'iso-octane et avec $d_i = 28 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,65$ ($\phi_\ell \leq 0,5$)

Même si la richesse totale et les carburants ne sont pas les mêmes, il semblerait que les tendances obtenues par les deux groupes de recherche concordent partiellement pour des richesses liquides élevées. La seule différence à noter est qu'avec Ballal et Lefebvre la vitesse adimensionnelle reste inférieure à 1 alors qu'avec Nomura et al. ce n'est pas le cas. La Figure 1.9 révèle aussi que Ballal et Lefebvre (1981) aboutissent à des tendances similaires à celles de Hayashi, Kumagai et Sakai (1976) pour de faibles ϕ_ℓ . Les différences constatées ici mettent de nouveau en avant la disparité des résultats expérimentaux.

Mélanges diphasiques globalement riches

Pour les mélanges riches, les tendances s'inversent. La Figure 1.10 présente la tendance obtenue par Nomura et al. (2000) pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$.

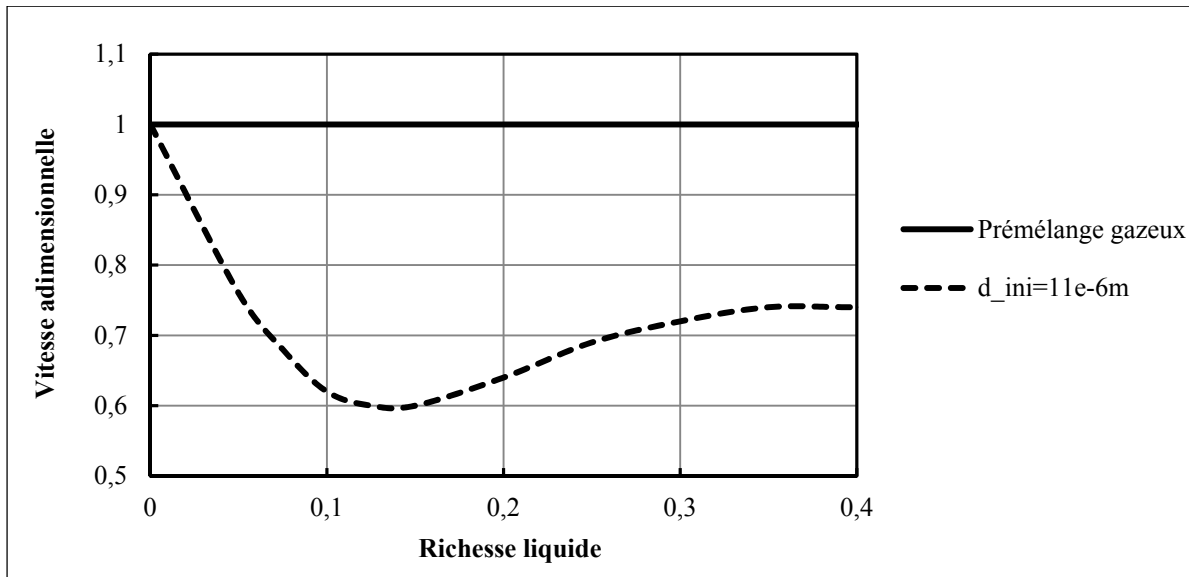


Figure 1.10 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ à $P_u = 2$ bar pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$ - Données tirées de Nomura et al. (2000)

Sur la Figure 1.10, S_L diminue quand ϕ_ℓ augmente, pour de faibles ϕ_ℓ , alors qu'elle diminue pour des ϕ_ℓ élevées. La première partie de cette courbe peut être comparée aux résultats obtenus par Hayashi, Kumagai et Sakai (1976). La Figure 1.11 permet cette comparaison.

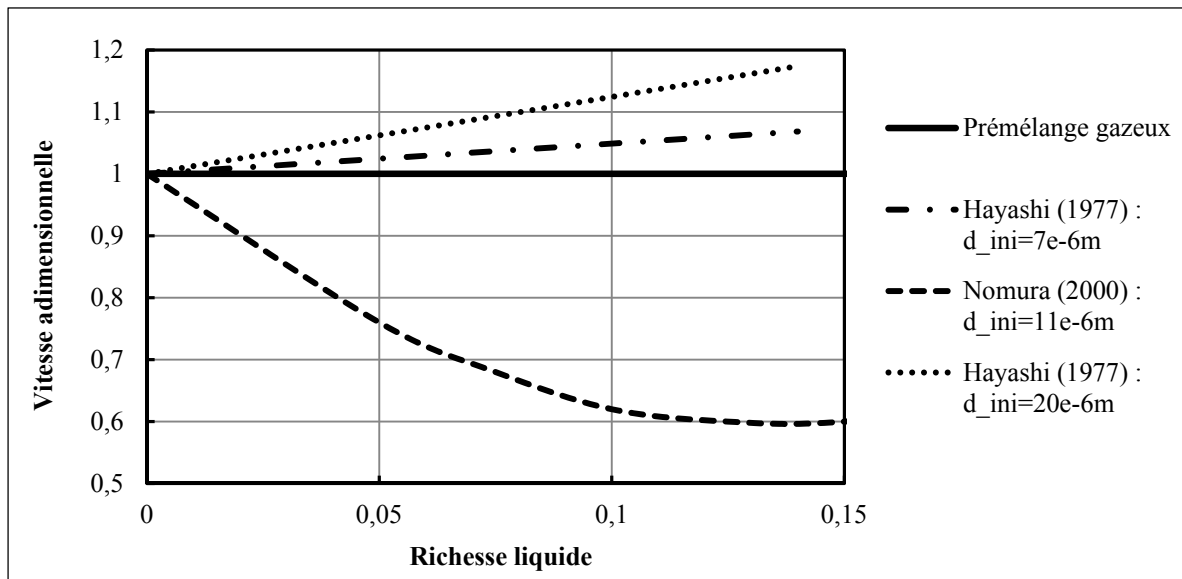


Figure 1.11 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) à ceux d'Hayashi et al. (1976) avec $\phi_o = 1,4$ et $d_i \leq 20 \mu\text{m}$

La superposition des courbes révèle un nouveau désaccord entre les deux groupes de recherche.

Influence de la pression des gaz frais

Pour illustrer l'influence de P_u sur l'évolution de S_L en fonction de ϕ_ℓ la Figure 1.12 a été tracée. Celle-ci présente les tendances adimensionnelles obtenues pour des mélanges diphasiques avec P_u entre 2 et 8 bar, $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$.

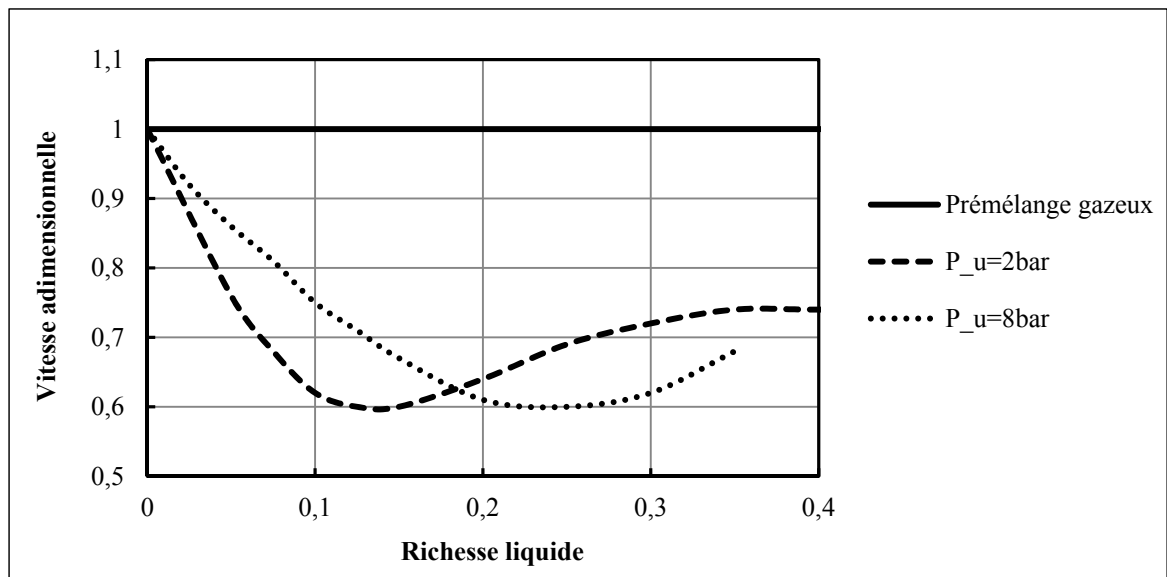


Figure 1.12 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec P_u entre 2 et 8 bar, $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$
- Données tirées de Nomura et al. (2007)

La superposition des courbes révèle que l'augmentation de la pression ne change pas la tendance décrite par S_L quand ϕ_ℓ augmente. La seule différence notable est le décalage des extrema vers des ϕ_ℓ plus élevées. Le même constat est obtenu pour des mélanges pauvres.

Bilan

Le Tableau 1.3 résume ce qui vient d'être expliqué concernant l'évolution de S_L en fonction de ϕ_ℓ . L'emphase sera de nouveau mise sur les contractions repérées dans la littérature.

Tableau 1.3 Récapitulatif des tendances de la littérature - S_L vs ϕ_ℓ

	Conditions	Tendances S_L vs ϕ_ℓ	Remarques
Variations de d_i - Mélanges pauvres	$d_i \leq 11 \mu\text{m}$; $\phi_o = 0,8$ → Nomura et al. (2000)	$S_L \nearrow$ puis \searrow quand $\phi_\ell \nearrow$	
	$d_i = 23$ à $40 \mu\text{m}$; $\phi_o = 0,8$ → Nomura et al. (2000)	$S_L \searrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$	
	$d_i \leq 20 \mu\text{m}$; $\phi_\ell \leq 0,15$; $\phi_o = 0,8$ → Hayashi et al. (1976)	$S_L \searrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$	<u>CONTRADICTION</u> avec Nomura et al. ($d_i \leq 11 \mu\text{m}$) <u>Explication :</u> Diminution due l'hétérogénéité de la concentration de la vapeur de carburant
	$d_i = 30 \mu\text{m}$; $\phi_o = 0,65$ → Ballal et Lefebvre (1981)	$S_L \searrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$	Tendance pour de l'isooctane En accord avec Hayashi et al. ($d_i \leq 20 \mu\text{m}$; $\phi_\ell \leq 0,15$)
		$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	<u>CONTRADICTION</u> avec Nomura et al. ($d_i = 28 \mu\text{m}$)
Variations de d_i Mélanges riches	$d_i = 11 \mu\text{m}$; $\phi_o = 1,4$ → Nomura et al. (2000)	$S_L \searrow$ puis \nearrow quand $\phi_\ell \nearrow$	
	$d_i \leq 20 \mu\text{m}$; $\phi_\ell \leq 0,15$; $\phi_o = 1,4$ → Hayashi et al. (1976)	$S_L \nearrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$	<u>CONTRADICTION</u> avec Nomura et al. ($d_i = 11 \mu\text{m}$)
Variations de P_u	$d_i = 11 \mu\text{m}$; $\phi_o = 0,8$ → Nomura et al. (2007)	$S_L \nearrow$ puis \searrow quand $\phi_\ell \nearrow$	ϕ_ℓ à laquelle l'extremum des courbes est atteint \nearrow quand $P_u \nearrow$
	$d_i = 11 \mu\text{m}$; $\phi_o = 1,4$ → Nomura et al. (2007)	$S_L \searrow$ puis \nearrow quand $\phi_\ell \nearrow$	

1.3.4 Évolution de la vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes

Dans cette nouvelle section, l'influence de la taille initiale des gouttes sur S_L sera étudiée en détails. Les tendances obtenues pour des mélanges pauvres seront tout d'abord analysées pour différentes ϕ_ℓ . Les interprétations physiques des chercheurs seront même précisées. Les tendances obtenues pour des mélanges riches seront ensuite présentées.

Mélanges diphasiques globalement pauvres

La Figure 1.13 illustre l'évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges pauvres avec ϕ_ℓ entre 0,3 et 0,41.

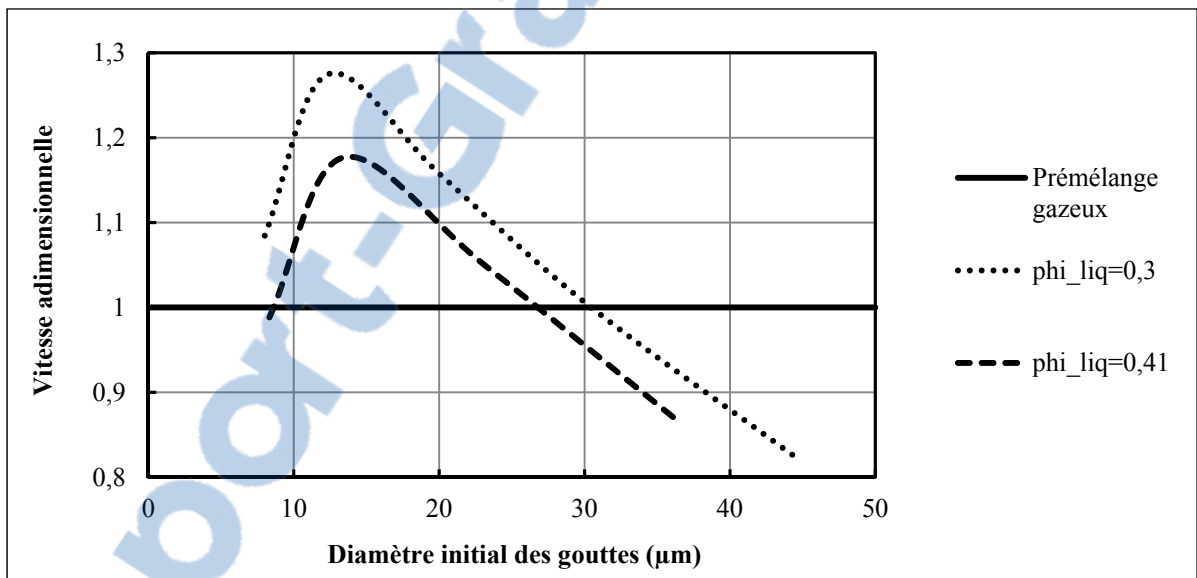


Figure 1.13 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i à $P_u = 2$ bar pour des mélanges diphasiques avec ϕ_ℓ entre 0,3 et 0,41 et $\phi_o = 0,8$ - Données tirées de Nomura et al. (2000; p.1001)

La Figure 1.13 amène au constat suivant : S_L augmente puis diminue quand d_i augmente. Entre 7 et 12 μm , l'augmentation est même très marquée. Les résultats numériques obtenus par Neophytou et Mastorakos (2009) amènent à des tendances similaires. La seule différence à noter est que pour Neophytou et Mastorakos (2009) $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$ quel que soit d_i alors que pour Nomura et al. ce n'est pas le cas.

Les recherches de Ballal et Lefebvre (1981) ont aussi montré que l'augmentation de d_i (pour $d_i \geq 30 \mu\text{m}$ et $\phi_o \leq 1$) amène à une diminution monotone de S_L . Les modèles numériques et théoriques développés respectivement par Zhu et Rogg (1996), Gauthier, Bardon et Rao (1996), et Lin et al. (1988; 1991) retrouvent aussi des tendances similaires pour de grosses gouttes. Sur ce point, les études concordent donc. Pour de plus faibles d_i , par contre, l'expression théorique de Ballal et Lefebvre (1981) prédit une diminution de S_L , ce qui vient s'opposer aux résultats de Nomura et al. (2000).

Pour expliquer l'évolution de la Figure 1.13, Nomura et al. (2000; 2007) rappellent que la présence de gouttes dans un mélange amène à une distribution de la densité de vapeur de carburant. Celle-ci est plus élevée près des gouttes (cf. Figure 1.14) et change selon leur taille puisque le taux d'évaporation et de mélange change aussi. Cette notion avait déjà été abordée par Myers et Lefebvre (1986) qui expliquaient que S_L est sensible à la densité de vapeur présente dans l'espace entre les gouttes.

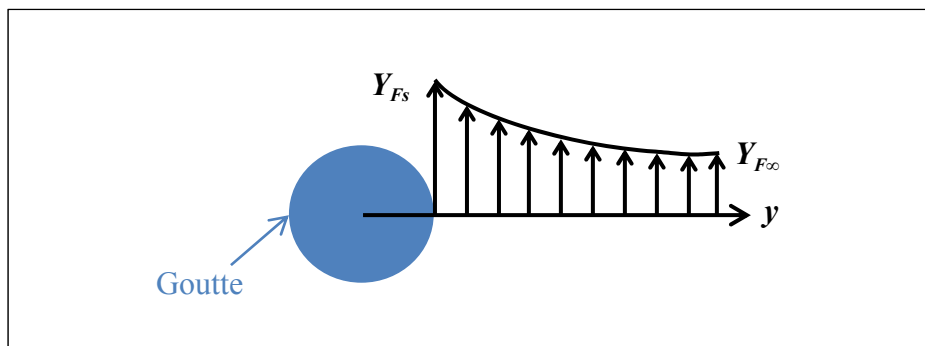


Figure 1.14 Schéma illustrant la distribution de la fraction massique de carburant autour d'une goutte en pleine évaporation

Les photographies prises par Hayashi et al. au cours de leurs études (1975; 1976), ont confirmé le développement d'un front de flamme ondulé et épais pour des gouttes d'environ $20 \mu\text{m}$ de diamètre. Pour de fines gouttes, le front de flamme reste lisse et continu comme celui obtenu avec des prémélanges gazeux. Avec de grosses gouttes, l'évaporation à l'avant du front de flamme étant faible et la richesse variant localement, la vitesse de combustion varie localement et le front de flamme se déforme. Avec de petites gouttes, l'évaporation à

l'avant du front de flamme et le mélange de la vapeur de carburant avec l'air sont importants. Le front de flamme reste donc bien plus lisse. Le changement de structure du front de flamme (associé au grossissement des gouttes) doit ainsi être pris en compte dans l'interprétation des différentes tendances.

Les courbes de la Figure 1.13 révèlent ainsi l'existence d'un diamètre critique. Hayashi et Kumagai (1975) l'ont défini comme le diamètre sous lequel les gouttes s'évaporent avant même d'atteindre la zone de réaction. Lin et al. (1988; 1991) utilisent même cette grandeur pour classer les différents modes de combustion des gouttes. Ainsi, si les gouttes sont beaucoup plus petites que le diamètre critique, elles s'évaporent avant d'entrer dans la flamme et la vapeur de carburant se mélange bien avec l'air. La vitesse de flamme d'un tel mélange concorderait donc avec celle d'un mélange gazeux homogène. Dans leur étude, Hayashi et Kumagai (1975) ont proposé une expression du diamètre critique. D'après leur corrélation, le diamètre critique serait inversement proportionnel à la vitesse de combustion.

Mélanges diphasiques globalement riches

Pour les mélanges diphasiques riches, peu d'essais expérimentaux ont été effectués. Les résultats mesurés par Hayashi, Kumagai et Sakai (1976) et par Nomura et al. (2000) pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,4$ et $\phi_l \leq 0,3$ ont été adimensionnés et rassemblés sur la Figure 1.15.

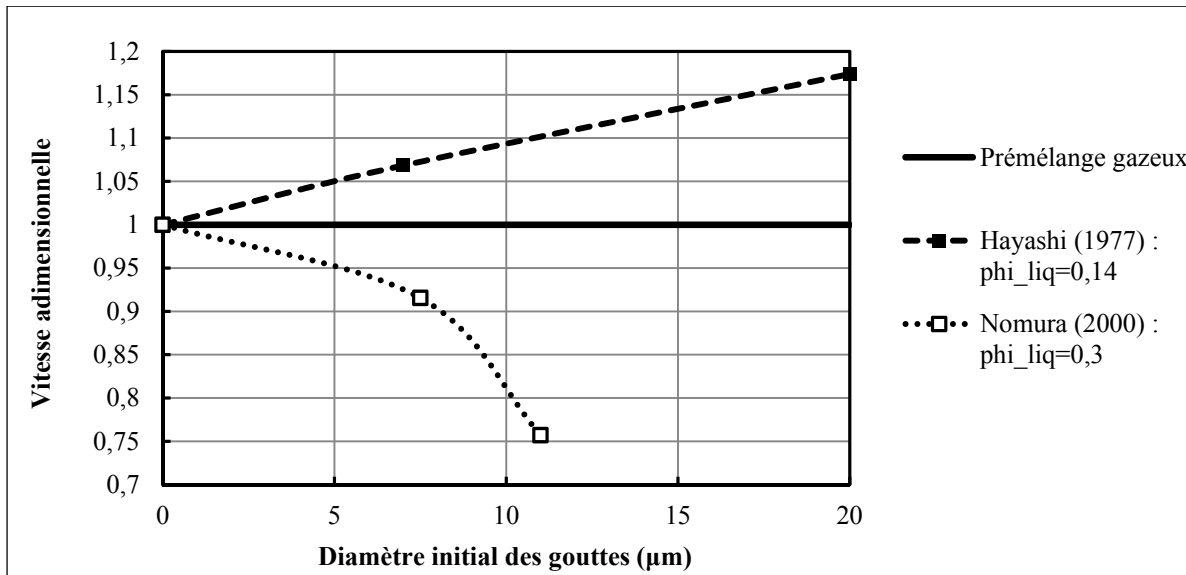


Figure 1.15 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,4$ et : $\phi_\ell = 0,14$ (Hayashi et al., 1976); $\phi_\ell = 0,3$ (Nomura et al., 2000)

La superposition des courbes met en avant des différences dans les tendances :

- dans l'étude d'Hayashi, Kumagai et Sakai (1976) où ϕ_ℓ est faible, S_L augmente;
- dans celle de Nomura et al. (2000) où ϕ_ℓ est élevée, S_L diminue.

Ces écarts de tendance peuvent soit être dus aux différences de ϕ_ℓ , soit révéler une nouvelle contradiction entre les résultats des groupes de recherche. Le manque de données ne permet pas vraiment de trancher.

Bilan

Comme pour les sections précédentes, le Tableau 1.4 fait le résumé des tendances constatées pour les courbes S_L vs d_i et rassemble les remarques importantes pouvant expliquer certaines évolutions.

Tableau 1.4 Récapitulatif des tendances de la littérature - S_L vs d_i

	Conditions	Tendances S_L vs d_i	Remarques
Variations de ϕ_ℓ - Mélanges pauvres	$\phi_o = 0,8; \phi_\ell = 0,3$ et $0,41$ → Nomura et al. (2000)	$S_L \nearrow$ puis \searrow quand $d_i \nearrow$	<u>Conséquences des grosses gouttes :</u> - Évaporation faible avant le front de flamme - Déformation du front de flamme Ballal et Lefebvre (1981) en désaccord avec la tendance obtenus pour de faibles d_i
Variations de ϕ_ℓ Mélanges riches	$\phi_o = 1,4; \phi_\ell = 0,14$ → Hayashi et al. (1976)	$S_L \nearrow$ quand $d_i \nearrow$	Peu de points → difficile d'expliquer les différences entre les tendances
	$\phi_o = 1,4; \phi_\ell = 0,3$ → Nomura et al. (2000)	$S_L \searrow$ quand $d_i \nearrow$	

1.3.5 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la pression initiale

Dans l'étude de Nomura et al. (2007), la variation de P_u a amené à une variation de S_L . La Figure 1.16 représente l'évolution de la vitesse adimensionnelle (calculée comme celle de la Figure 1.6) en fonction de P_u pour des mélanges gazeux ainsi que pour des mélanges liquides avec $d_i = 8,5 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,6 et 1,2.

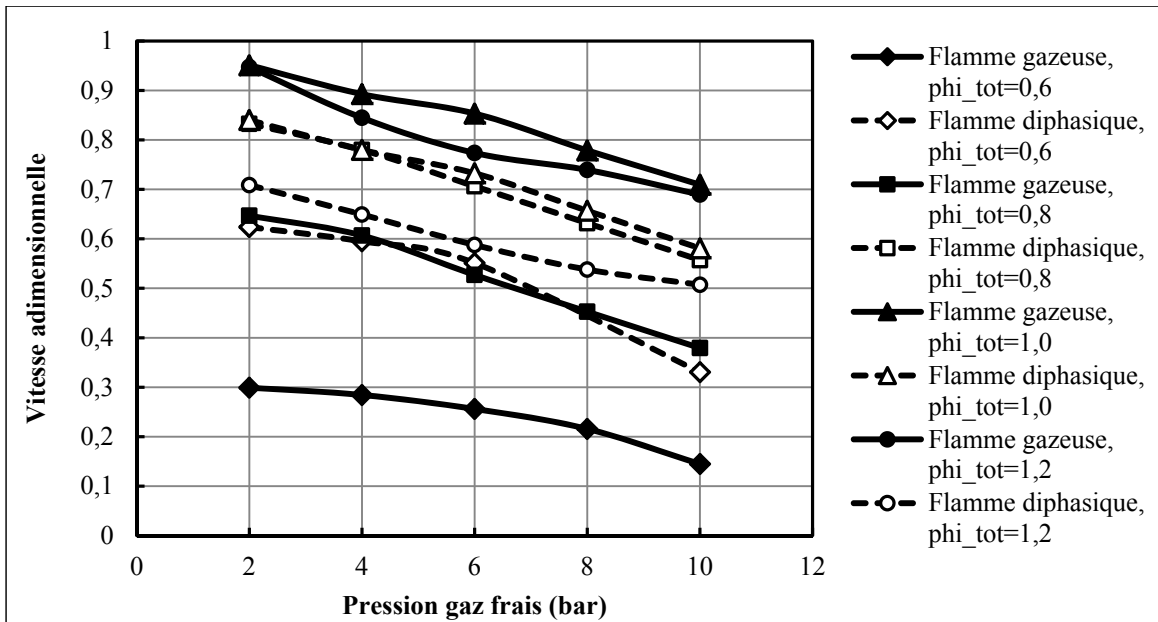


Figure 1.16 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8,5 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,6 et 1,2, et pour des mélanges gazeux équivalents - Données tirées de Nomura et al. (2007; p.2136)

La superposition des courbes montre que S_L diminue quand P_u augmente quelles que soient les richesses totales testées. Lorsque les mélanges sont globalement très pauvres, les gouttes ont en outre un effet « positif » sur la propagation de flamme (la vitesse de flamme des mélanges diphasiques est supérieure à celle d'un mélange gazeux équivalent) alors que pour des mélanges stœchiométriques et riches elles ont un effet « inhibiteur » ($S_{L,diph} < S_{L,gaz}$). Dans leur étude, Nomura et al. précisent que cet effet inhibiteur peut provenir de la baisse de température dans la zone de réaction induite par l'évaporation des gouttes (processus endothermique). Ainsi, d'après ces résultats, de fines gouttes de carburant dans un mélange globalement très pauvre et à haute pression permettraient d'améliorer la propagation de la flamme.

Les observations expérimentales de la propagation de la flamme menées dans le cadre de cette étude ont ensuite montré que la variation de P_u provoque une déformation de la flamme. Très plissé à une pression de 10 bar, le front de flamme en milieu diphasique se déforme

quelque peu à 2 bar. À basse pression, les mélanges diphasiques se rapprochent donc des cas gazeux puisqu'en milieu gazeux, le front de flamme reste aussi relativement lisse.

Bilan

Le Tableau 1.5 fait le résumé de ce qui a été décrit dans cette section.

Tableau 1.5 Récapitulatif des tendances de la littérature- S_L vs P_u

Conditions	Tendances S_L vs P_u	Remarques
	$S_L \searrow$ quand $P_u \nearrow$	Tendance générale (quelle que soit ϕ_o) Déformation du front de flamme quand $P_u \nearrow$
$\phi_o < 1; \phi_\ell = 0,2; d_i = 8,5\mu\text{m}$ → Nomura et al. (2007)	$S_{L,diph} > S_{L,gaz}$	Effet « positif »
$\phi_o \geq 1; \phi_\ell = 0,2; d_i = 8,5\mu\text{m}$ → Nomura et al. (2007)	$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	Effet « inhibiteur » induit par l'évaporation des gouttes (endothermique)

1.4 Modèle monodimensionnel de la propagation de flammes prémélangées

Comme nous venons de le constater, la littérature est riche en études dédiées au problème de la propagation monodimensionnelle de flammes prémélangées. De nombreuses recherches numériques ont été menées dans ce domaine afin de compléter et reproduire les résultats expérimentaux.

En milieu purement gazeux, ce type de problème a été principalement étudié afin de valider ou développer des cinétiques chimiques. Dans leur étude, par exemple, Franzelli et al. (2010) sont parvenus à valider leur cinétique réduite pour le kérosène en montrant qu'il est possible d'obtenir des tendances numériques proches des tendances expérimentales. D'autres études ont utilisé des modèles monodimensionnels pour caractériser la propagation des flammes :

- Dans leur étude, Erjiang et al. (2009) ont modélisé des flammes méthane/hydrogène-air et ont révélé que l'augmentation de la concentration en hydrogène tend à augmenter S_L et a un impact sur la formation de l'oxyde d'azote (NO) : pour des mélanges stœchiométriques, l'effet reste faible alors que pour des mélanges riches les NO diminuent significativement.
- Lafay et al. (2008) ont réalisé une étude similaire et ont montré que l'ajout d'hydrogène a aussi une influence sur l'épaisseur de la flamme et sur le taux de chaleur dégagée.
- D'autres carburants ont aussi été testés dans les recherches antérieures. Yu et al. (2014) ont, par exemple, étudié des flammes de diméthyl éther/méthane-air. Ils ont constaté que l'augmentation de la concentration de diméthyl éther (DME) dans le mélange frais entraîne une augmentation de S_L , diminue la sensibilité de la flamme vis-à-vis de la pression et diminue l'épaisseur de flamme.
- Wu et al. (2014), quant à eux, se sont intéressés aux flammes de n-butane/DME-air et ont montré que S_L diminue quand la concentration de DME augmente.

Dans chacune de ces études, les tendances du modèle ont été comparées à celles obtenues expérimentalement. La proximité des résultats démontre que les simulations numériques reproduisent fidèlement la combustion dans de tels mélanges.

En milieu diphasique, les études numériques sont également nombreuses. Plusieurs recherches ont concerné l'impact des sprays d'eau sur la propagation de flammes de méthane et d'air : Rogg (1996) et Chen, Rogg et Bray (1993). Les modélisations ont notamment cherché à reproduire et à analyser l'effet inhibiteur de l'eau sur la flamme. D'autres recherches ont étudié des flammes se propageant dans des milieux contenant des gouttes de carburant. Zhu et Rogg (1996) se sont intéressés à un mélange diphasique octane-air alors que Neophytou et Mastorakos (2009) ont utilisé du n-heptane et du n-décane. Dans ces études, les auteurs ont notamment montré que l'évolution de S_L en fonction de d_i n'est pas monotone : pour des gouttes dont le diamètre reste inférieur à 20 μm , S_L tend à augmenter avec le diamètre alors que c'est le contraire pour de plus grosses gouttes. L'augmentation de la taille des gouttes semble aussi avoir un impact sur le profil de température et les fractions

massiques. Zhu et Rogg (1996) indiquent notamment que pour de grosses gouttes ($d_i > 34 \mu\text{m}$) une diminution de la température de la flamme est à noter. Au niveau de la fraction massique de dioxygène, il est aussi intéressant de relever que les grosses gouttes induisent une certaine déformation du profil. L'oxydation du carburant semble ainsi se poursuivre sur une plus longue distance. À ce propos, Zhu et Rogg (1996) expliquent que l'influence des grosses gouttes viendrait de leur pénétration dans la flamme. Dans leur étude, Neophytou et Mastorakos (2009) précisent même que ce phénomène de pénétration des gouttes induit une diminution de la richesse en amont de la flamme ce qui a des répercussions directes sur les réactions chimiques et le profil de chaleur dégagée. Pour quantifier l'état d'avancement de l'évaporation des gouttes, les chercheurs ont défini une grandeur appelée « richesse effective ». Ce raisonnement sera repris et détaillé au cours du chapitre 3 du présent mémoire.

Enfin, les analyses menées dans les recherches antérieures nous en apprennent beaucoup sur la combustion et sur l'influence des gouttes. Même si la littérature semble riche, elle manque encore d'études numériques centrées sur la propagation de flammes en milieu diphasique et dont le carburant de base est l'éthanol. Une lacune que nous tenterons de combler avec ce mémoire.

1.5 Bilan

L'influence des gouttes sur la propagation d'une flamme reste assez complexe puisque certains phénomènes physiques peuvent « se confronter » dans ce type de mélange.

Ce qu'il faut retenir des phénomènes physiques observés est que :

- la taille des gouttes influence le taux d'évaporation,
- l'évaporation tardive des grosses gouttes peut être source d'un refroidissement local (processus endothermique),
- l'hétérogénéité de la richesse peut influencer la propagation de la flamme et déformer le front de flamme,
- la pression améliore l'évaporation des gouttes dans la zone de préchauffage.

Les analyses développées dans ce chapitre sont toutefois à considérer avec précaution puisque dans la pratique, pour faire varier les paramètres du mélange diphasique (ϕ_o , ϕ_l , d_i et P_u), la température est aussi modifiée (Hayashi et Kumagai, 1975; Nomura et al., 2007). Ainsi, à chaque point des courbes correspond une température différente dont les auteurs ne donnent pas la valeur. Sur les tendances expérimentales, l'influence de la température ne peut donc être discernée de celle des autres paramètres du mélange initial. Cette remarque sera très importante lors du chapitre 3.

1.6 Objectifs de l'étude

Finalement, cette revue de la littérature a montré quelques « limites » :

- les études sur de l'éthanol pur restent rares,
- certaines conditions de mélange ont été trop peu étudiées et le manque de données ne permet pas de tirer de conclusions;
- dans les recherches portant sur la propagation en milieu diphasique, les chercheurs font varier le plus souvent la richesse liquide et le diamètre de gouttes, mais très peu d'études sont consacrées à l'influence des autres paramètres physiques tels que la pression des gaz frais;
- les conditions expérimentales des études sur l'éthanol restent floues ce qui complique les comparaisons et les analyses;
- il existe quelques contradictions dans les résultats de la littérature tel qu'illustré dans les tableaux récapitulatifs 1.2 à 1.5.

Considérant l'intérêt croissant pour les biocarburants tels que l'éthanol, il nous a semblé important d'étudier ce carburant et d'essayer de combler les lacunes de la littérature. Le principal objectif de cette étude est d'évaluer numériquement l'influence des gouttes sur la propagation d'une flamme laminaire prémélangée.

Pour atteindre cet objectif, les sous-objectifs suivants ont été définis :

1. Définir et valider un modèle monodimensionnel de la propagation de flammes en milieu diphasique;

2. Quantifier l'impact de la taille des gouttes, de la richesse liquide et totale, et de la pression des gaz frais sur la vitesse de flamme;
3. Analyser l'effet des gouttes sur la structure de la flamme et étudier dans quelles conditions l'évaporation se fait complètement en amont de la flamme afin d'expliquer les tendances obtenues pour la vitesse de flamme;
4. Proposer une corrélation permettant de prédire les comportements observés.

Dans les cas étudiés au cours de ce projet, la température a été fixée à 300 K. Son effet sur la flamme ne sera donc pas étudié ici. Nous avons fait ce choix afin de pouvoir évaluer l'influence des autres paramètres indépendamment de la température des gaz frais.

CHAPITRE 2

MODÈLE NUMÉRIQUE

2.1 Introduction

Les résultats présentés dans cette étude ont été obtenus grâce au logiciel commercial, COSILAB. Ce logiciel de simulation, spécialisé dans l'étude des écoulements réactifs, permet de résoudre des problèmes complexes impliquant des cinétiques chimiques plus ou moins détaillées. COSILAB a été choisi parce qu'il permet d'étudier des problèmes diphasiques et parce que sa routine de base, RUN 1DL, est une référence dans le domaine de l'étude des écoulements réactifs. Les équations et modèles utilisés par COSILAB seront d'abord détaillés dans ce chapitre. L'approche numérique et le paramétrage du modèle seront ensuite abordés. La validation du modèle sera finalement présentée. Elle s'articulera autour de deux étapes : la validation de la cinétique et du modèle d'évaporation.

2.2 Équations et modèles

L'étude des écoulements réactifs combine plusieurs domaines : la mécanique des fluides, la thermodynamique et la chimie. La prochaine partie sera ainsi dédiée à l'explication des modèles physiques utilisés sous COSILAB. Les hypothèses physiques seront détaillées et les définitions les plus importantes seront précisées.

2.2.1 Présentation du problème et hypothèses de base

Le problème de propagation de flamme en milieu diphasique est un très vaste sujet de recherche. L'étude menée ici a donc dû être circonscrite à l'analyse de la propagation libre de flammes prémélangées et monodimensionnelles. La plupart des tests ont été réalisés dans un environnement à 300 K et 2 bar, et pour des richesses et tailles de gouttes variées.

L'autre limitation de cette étude provient des hypothèses simplificatrices émises dans les modèles théoriques utilisés :

- Dans les équations principales pour la phase gazeuse, l'écoulement réactif est supposé lent, c'est-à-dire avec un faible nombre de Mach.
- Les effets de la dissipation visqueuse sont négligés, et la pression est supposée constante.
- La phase gazeuse est considérée comme étant un mélange de gaz parfaits comprenant K espèces chimiques. Une de ces espèces est supposée être présente dans la phase liquide et gazeuse (dans notre cas, l'éthanol). Les formulations données dans les parties suivantes seront donc basées sur l'hypothèse d'une seule espèce liquide.
- La phase liquide se compose de plusieurs gouttes de même taille et ces dernières sont supposées sphériques.
- Le mélange diphasique est aussi supposé uniforme.
- Le problème considéré est monodimensionnel.

Ces hypothèses situent donc cette étude dans un contexte bien particulier.

2.2.2 Phase gazeuse - Équations et conditions aux limites

Dans cette partie, les équations gouvernant la phase gazeuse seront présentées pour des flammes prémélangées monodimensionnelles se propageant librement. Les équations des transferts de masse, de quantité de mouvement et d'énergie entre les phases seront notamment détaillées. Ces équations seront données sous leur forme simplifiée avec \bar{y} comme direction de propagation de la flamme.

Équation de conservation de la masse

La conservation de la masse de la phase gazeuse pour un système diphasique est gouvernée par l'équation suivante (Neophytou, 2010) :

$$\frac{\partial(\gamma_g \rho_g)}{\partial t} + \frac{\partial(\gamma_g \rho_g v_g)}{\partial y} = S_m \quad (2.1)$$

où t et y désignent respectivement la coordonnée temporelle et la coordonnée spatiale ; v_g est la vitesse du mélange gazeux; ρ_g représente la masse volumique du gaz; et γ_g , correspond à la fraction volumique occupée par le gaz. Le terme gauche de l'équation (2.1) représente ainsi le taux de variation de la masse du mélange gazeux (par unité de volume) et est composé deux termes : le premier correspond à la variation locale de la masse du mélange gazeux, et le second est le terme de convection. Le terme source S_m est défini comme la masse gazeuse (par unité de volume et de temps) qui est transférée entre les deux phases. Il est donné par la formule suivante (Neophytou, 2010) :

$$S_m = n\dot{m}_d \quad (2.2)$$

avec \dot{m}_d le taux d'évaporation massique d'une goutte seule, et n la densité numérique de goutte (i.e. le nombre de gouttes par unité de volume), définie comme suit :

$$n = (1 - \gamma_g) \frac{6}{\pi d^3} = \gamma_\ell \frac{6}{\pi d^3} \quad (2.3)$$

où γ_ℓ est la fraction volumique occupée par la phase liquide.

Équations de conservation des espèces

Les équations de conservation des espèces gazeuses peuvent être écrites comme suit (Neophytou, 2010) :

$$\frac{\partial(\gamma_g \rho_g Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_g \rho_g Y_k v_g) = -\frac{\partial}{\partial y}(\gamma_g \rho_g V_k Y_k) + \gamma_g \omega_k \quad (2.4)$$

Où Y_k désigne la fraction massique de la k -ième espèce gazeuse ($k=1, \dots, K$); V_k représente sa vitesse de diffusion; ω_k est son taux de production massique par unité de volume gazeux (production chimique).

Le terme gauche de l'équation (2.4) représente le taux de variation de la masse de la k -ième espèce gazeuse (par unité de volume). Il réunit le terme de variation locale et celui de convection. À droite de l'équation, le premier terme correspond aussi à un terme de convection, alors que le second symbolise la production chimique des espèces gazeuses (par unité de volume). L'équation (2.4) s'applique à toutes les espèces gazeuses du mélange, à l'exception de la vapeur de carburant. Pour cette espèce, le terme S_m doit être ajouté dans le terme de droite de l'équation (2.4) afin d'intégrer la contribution des gouttes (induite par leur évaporation).

Équation de conservation du mouvement

L'équation de conservation du mouvement de la phase gazeuse peut être écrite sous la forme suivante (Neophytou, 2010) :

$$\frac{\partial(\gamma_g \rho_g v_g)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_g \rho_g v_g v_g) = -\frac{\partial P}{\partial y} - \frac{\partial \tau}{\partial y} + S_v \quad (2.5)$$

Ici :

- τ désigne la partie visqueuse du tenseur des contraintes (Zhu et Rogg, 1996) et s'exprime comme suit :

$$\tau = \frac{4}{3} \left(\gamma_g \mu_g \frac{\partial v_g}{\partial y} \right) \quad (2.6)$$

avec μ_g , la viscosité dynamique de la phase gazeuse ;

- P est la pression (en Pa);
- S_v représente une source (ou un puits) de quantité de mouvement dans la phase gazeuse due à la présence de la phase liquide.

Ce dernier terme correspond à la variation de la quantité de mouvement des gouttes et s'exprime comme suit :

$$S_v = -n \left[m_d \frac{dv_d}{dt} - \dot{m}_d v_d \right] = S_m v_d - n m_d \frac{dv_d}{dt} \quad (2.7)$$

Avec m_d la masse d'une goutte seule; v_d la composante selon \bar{y} de la vitesse de la goutte.

Le terme gauche de l'équation (2.5) représente le taux de variation de la quantité de mouvement du mélange gazeux (par unité de volume). À droite de l'équation, les deux premiers termes représentent la puissance des contraintes de Cauchy (pression et contraintes visqueuses) par unité de volume.

Équation de conservation de l'énergie

L'équation de conservation de l'énergie de la phase gazeuse s'écrit comme suit (Neophytou, 2010) :

$$\frac{\partial(c_{pg} \gamma_g \rho_g T_g)}{\partial t} + \frac{\partial(c_{pg} \gamma_g \rho_g T_g v_g)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\gamma_g k_g \frac{\partial T_g}{\partial y} \right) - \gamma_g \sum_{k=1}^K h_k \omega_k + S_e \quad (2.8)$$

Ici c_{pg} est la chaleur spécifique à pression constante du mélange gazeux; k_g , sa conductivité thermique; h_k , l'enthalpie spécifique des espèces k ; et T_g , la température de la phase gazeuse. Le terme source S_e représente le flux total de chaleur traversant la surface des gouttes :

$$S_e = -n [\dot{q} + \dot{m}_d (c_{pF} (T_g - T_s) + L_v)] \quad (2.9)$$

Où \dot{q} , est la chaleur transférée à l'intérieur de la goutte (réchauffement), c_{pF} la capacité thermique spécifique de la vapeur de carburant, T_s la température de surface de la goutte, et L_v la chaleur latente spécifique de vaporisation au point d'ébullition.

Le terme gauche de l'équation (2.8) représente le taux de variation de l'enthalpie du mélange gazeux (par unité de volume). À droite, le premier terme correspond au taux de chaleur échangée par conduction, et le second symbolise la contribution énergétique due aux réactions chimiques.

Conditions aux limites

Les équations pour la phase gazeuse ayant été établies, il est désormais nécessaire de préciser quelles sont les conditions aux limites. Mais la définition des limites devra être préalablement abordée. En effet, les conditions aux limites sont théoriquement à appliquer infiniment loin en amont et en aval de la flamme pour la masse volumique ρ_g , la température T_g , et la composition Y_k (ou X_k , $k = 1, \dots, K$), du mélange gazeux. La limite lointaine en amont sera appelée la « limite froide », et celle en aval, la « limite chaude ». Ces distances seront choisies afin que les limites soient suffisamment éloignées de la flamme et qu'elles n'aient pas d'influence sur les résultats. Dans la section 2.4, consacrée à l'étude de la sensibilité des paramètres numériques, l'influence de ces distances sera détaillée. Pour la suite, la convention suivante sera adoptée : la limite froide est la frontière gauche du domaine de calcul, la limite chaude est la frontière droite.

Pour obtenir des prédictions précises, il est donc important de s'assurer que le domaine de calcul soit suffisamment étendu à gauche pour que le profil de température y atteigne la température des gaz frais T_u (imposée par l'utilisateur) avec une pente pratiquement nulle (comme représentée sur la Figure 2.1). Si ce point n'est pas vérifié, on peut constater à la limite froide l'apparition de pertes de chaleur artificielles (par conduction). En général, des prédictions imprécises de la vitesse de flamme s'ensuivent. La condition de gradient nul à la limite froide s'applique aussi pour les concentrations des espèces (fractions molaires ou massiques).

Du côté droit, il n'est pas utile de trop augmenter le domaine. Les processus physiques et chimiques se déroulant après la flamme (les processus de recombinaison typiquement) n'ont pas une influence essentielle sur la vitesse et la structure de la flamme. Des gradients nuls

seront cependant imposés pour toutes les variables dépendantes. La distance d'éloignement de la frontière chaude sera donc choisie de manière à ce que toutes les variables approchent « doucement » une valeur limite constante.

Pour étudier numériquement une flamme, il est aussi intéressant d'ancrer celle-ci dans un système de référence. En effet, si le système se déplace à la vitesse de la flamme, S_L , la flamme peut alors être considérée comme fixe ou stationnaire dans ce système. Les équations s'en trouvent simplifiées. Pour la suite, nous considérerons une flamme ancrée à un système de référence. Le domaine de calcul $[y_u; y_b]$ est tel que y_u est la localisation de la limite froide, et $y_b (> y_u)$ celle de la limite chaude. Pour une pression donnée, $P(t)$, les conditions aux limites numériques peuvent ainsi être formulées comme suit :

$$T = T_u \quad , \quad Y_k = Y_{ku} \quad \text{avec } k=1, \dots, K \quad \text{à } y=y_u \quad (2.10)$$

$$\partial T / \partial y = \partial Y_k / \partial y = 0 \quad \text{avec } k=1, \dots, K \quad \text{à } y=y_b \quad (2.11)$$

$$T = T_0 \quad \text{à } y=y_0 \quad (2.12)$$

Les conditions imposées pour la température ont été schématisées sur la Figure 2.1.

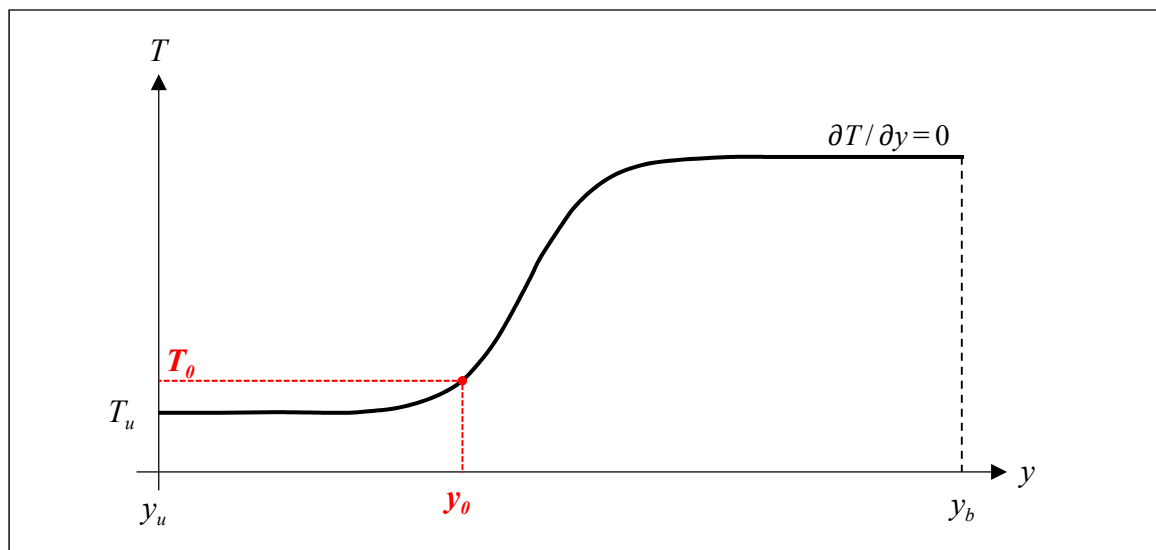


Figure 2.1 Schéma illustrant les conditions aux limites imposées pour le profil de température

L'équation (2.12) sert à fixer la flamme par rapport au domaine de calcul. Dans la pratique, T_0 est égale à $T_u + 100 \text{ K}$, et y_0 est sélectionné approximativement comme $y_u + (y_b - y_u)/3$ (cf. le manuel utilisateur de COSILAB).

Si à la fin du calcul numérique, les conditions aux limites exposées ci-dessus et la condition de pente nulle aux frontières ne sont pas vérifiées, alors le domaine de calcul doit être augmenté en prenant un y_u plus faible et/ou un y_b plus large (sans faire varier y_0 et T_0). Après l'augmentation du domaine, le calcul est relancé avec les résultats précédemment obtenus comme profils initiaux (pour faciliter la convergence).

2.2.3 Phase liquide - Équations et conditions aux limites

La seconde partie des équations utilisées dans COSILAB concerne la phase liquide et les transferts entre les phases. Le modèle utilisé ici est celui proposé par Abramzon et Sirignano (1989).

Équation de conservation de la masse

L'évolution du diamètre $d(t)$ d'une goutte sphérique (de diamètre initial, d_i) est obtenue grâce à l'équation de conservation de la masse de la goutte :

$$\frac{dm_d}{dt} = -\dot{m}_d \quad (2.13)$$

dont la solution doit vérifier la condition initiale suivante:

$$m_{di} = \rho_d \frac{\pi d_i^3}{6} \quad (2.14)$$

Ici m_{di} est la masse initiale de la goutte et ρ_d sa masse volumique. L'expression du taux massique d'évaporation, \dot{m}_d , sera détaillée dans l'ANNEXE IV (cf équations (A IV-9) et (A IV-10)).

Équation de mouvement

Dans le cas général, la trajectoire d'une goutte seule est déterminée par ses coordonnées $(x_d(t), y_d(t))$. À l'instant initial ($t=0$ s), la goutte est à la position $(x_d(0), y_d(0))$ avec la vitesse $(u_d(0), v_d(0))$. L'équation de mouvement, pour un écoulement gazeux monodimensionnel et des gouttes ayant une vitesse initiale parallèle à la direction de l'écoulement gazeux \bar{y} , se réduit à l'équation suivante (Abramzon et Sirignano, 1989):

$$\frac{d^2 y_d}{dt^2} = \frac{3C_D}{4d} \left(\frac{\rho_\infty}{\rho_d} \right) v_r |v_g - v_d| \quad (2.15)$$

Avec $v_r = v_g - v_d$ la vitesse relative des gouttes par rapport au gaz; ρ_∞ la masse volumique du mélange gazeux environnant (loin des gouttes et de la flamme) et C_D le coefficient de traînée, défini comme suit :

$$C_D \equiv \frac{F_D}{\frac{1}{8} \rho_\infty v_r^2 \pi d^2} \quad (2.16)$$

où F_D est l'amplitude de la force de traînée. Dans l'équation du mouvement, la force induite par le gradient de pression, la force volumique et le terme de Basset ont été négligés. Les manuels de COSILAB expliquent en effet que ces termes sont négligeables dans la réalité.

L'équation (2.15) doit vérifier les conditions initiales suivantes :

$$\begin{aligned} y_d(0) &= y_{di} \\ v_d(0) &= v_{di} \end{aligned} \quad (2.17)$$

La traînée agissant sur une goutte est un effet aérodynamique important. Cependant, le mouvement d'une goutte s'évaporant diffère de celui d'une goutte ne s'évaporant pas (à cause de la force d'inertie induite par débit massique d'évaporation). Par conséquent, la force de traînée agissant sur la goutte s'évaporant est différente de celle s'appliquant sur une goutte ne s'évaporant pas. Afin de prendre en compte le transfert de moment gaz-liquide, la corrélation suivante a été utilisée par Abramzon et Sirignano (1987) après avoir été conseillée par Yuen et Chen (1976) :

$$C_D = \frac{24}{\text{Re}} \left(1 + \frac{\text{Re}^{2/3}}{6} \right) \quad (2.18)$$

avec $\text{Re} < 1000$ (Lefebvre, 1989), le nombre de Reynolds dont la définition est indiquée dans l'ANNEXE IV (cf équation (A IV-4)).

Équation de conservation de l'énergie

Passons maintenant à l'équation de conservation de l'énergie. L'équation de la conduction de la chaleur en coordonnées sphériques donne (Sirignano, 1983) :

$$\frac{\partial T_d}{\partial t} = \alpha_d \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial T_d}{\partial r} \right) \quad (2.19)$$

avec T_d la température de la goutte; α_d sa diffusivité thermique; et r la coordonnée radiale.

Elle doit vérifier la condition initiale :

$$T_d(r, 0) = T_{di} \quad (2.20)$$

et les conditions aux limites :

$$\left. \frac{\partial T_d}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad \left. \frac{\partial T_d}{\partial r} \right|_{r=\frac{d(t)}{2}} = \frac{\dot{q}}{\pi d^2 \alpha_d \rho_d c_{pd}} \quad (2.21)$$

L'analyse des procédés de transferts de masse et de chaleur dans la phase gazeuse près de la surface de la goutte permet de déterminer le taux instantané d'évaporation des gouttes, \dot{m}_d , et la quantité de chaleur pénétrant à l'intérieur de la goutte, \dot{q} . Selon Abramzon et Sirignano (1989), ces transferts sont supposés quasi-stationnaires : la chute de pression dans le gaz est négligée, et les propriétés thermodynamiques sont prises comme des constantes évaluées à la température et à la composition de référence (« règle 1/3 » détaillée en ANNEXE III).

Pour prendre en compte l'effet du transport convectif causé par le mouvement de la goutte par rapport au gaz, la « théorie de film » a été employée. Dans cette théorie, le transfert de la masse et de la chaleur entre la surface de la goutte et le mélange gazeux extérieur s'effectue à l'intérieur d'un film représenté sur la Figure 2.2.

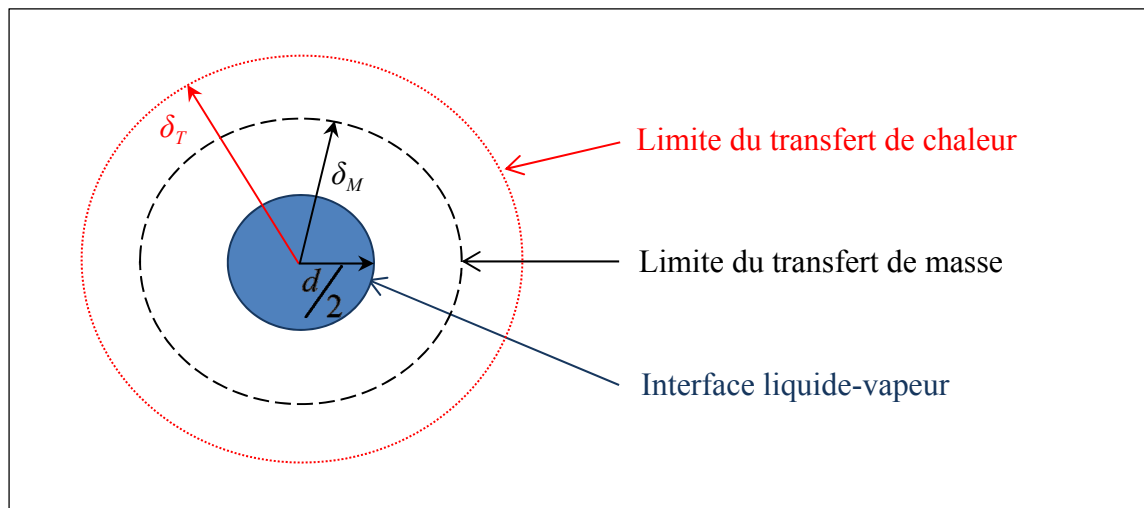


Figure 2.2 Schéma du film entourant la goutte

Ce film fictif se décompose en deux couches :

- celle d'épaisseur δ_T (en pointillés sur la Figure 2.2) dans laquelle les transferts de chaleur sont significatifs;
- et celle d'épaisseur δ_M , dans laquelle les transferts de masse prédominent.

Cette méthode a été détaillée dans l'ANNEXE IV.

2.2.4 Chimie et propriétés

Dans cette étude, la cinétique proposée par Marinov (1999) a été utilisée. Cinétique détaillée pour des oxydations à haute température de l'éthanol, elle contient 56 espèces et 351 réactions, et a été assemblée à partir de plusieurs sous-mécanismes développés pour l'oxydation de l'hydrogène, du méthane, de l'éthylène, de l'éthane et du propane. Dans son étude, Marinov précise que sa cinétique a été validée pour une large variété de données expérimentales. Les propriétés thermodynamiques utilisées dans cette cinétique ont été en partie extraites de tables thermodynamiques et en partie estimées par Marinov. Elles sont valides sur une plage de température allant de 300 K à 5000 K.

Les propriétés de transport nécessaires pour la simulation d'écoulements réactifs laminaires sont la viscosité dynamique et la conductivité thermique du mélange gazeux, et les coefficients moyens de diffusion thermique des espèces. Les données thermodynamiques nécessaires sont les capacités calorifiques spécifiques à pression constante des espèces pures c_{pk} , la capacité calorifique spécifique à pression constante du mélange gazeux $c_{pg} (= \sum Y_k c_{pk})$ et les enthalpies spécifiques des espèces pures h_k .

Pour des cinétiques détaillées comme celles de Marinov, il est déconseillé d'utiliser un modèle simplifié pour calculer les propriétés thermophysiques. Ainsi, dans COSILAB, le calcul de la viscosité dynamique, de la conductivité thermique et des coefficients de diffusion se fait au moyen de formules complexes (cf. Hirschfelder, Curtiss et Bird (1954)). Pour le calcul des capacités calorifiques, des enthalpies et des entropies des courbes de régression polynomiale sont utilisées.

2.3 Résolution numérique

Pour résoudre numériquement un problème d'écoulement réactif, la méthode numérique doit être choisie judicieusement. Les termes source rendent la résolution numérique d'un problème d'écoulement réactif laminaire considérablement plus difficile que la résolution

d'un problème d'écoulement non réactif équivalent. Dans les sections suivantes, nous aborderons ainsi la méthode numérique et nous détaillerons la procédure de calcul.

2.3.1 Discrétisation numérique

L'utilisation de méthodes adaptatives, c'est-à-dire de méthodes qui adaptent automatiquement et de façon optimale le maillage, est une approche numérique très utilisée dans tous les problèmes d'ingénierie (Rogg, 1991). Pour le calcul d'écoulements réactifs, elle est même indispensable. En effet, la chaleur dégagée au cours du processus de combustion a un impact direct sur les profils des quantités impliquées dans ce même processus : ils présentent d'importants gradients et une forte courbure. L'usage de maillages adaptatifs est ainsi nécessaire afin de pouvoir contrôler les erreurs dues aux discrétisations temporelle et spatiale.

Dans cette étude, la méthode de Newton modifiée (ou amortie) a été principalement utilisée (Rogg, 1991). Elle permet de résoudre efficacement des problèmes non linéaires, même lorsque les estimations initiales sont éloignées de la solution finale. Notons aussi qu'avec le modèle utilisé dans le présent mémoire, la solution d'un problème stationnaire est obtenue en résolvant une version du problème dépendant du temps jusqu'à ce que l'état stationnaire soit approché. Pour les dérivées spatiales, des approximations par différences centrées ou unilatérales sont utilisées alors que pour les dérivées temporelles, il s'agit d'un schéma d'Euler implicite. Cette méthode est détaillée dans l'ANNEXE V.

2.3.2 Procédure de calcul

En diphasique, les équations de la phase gazeuse et de la phase liquide sont fortement couplées. Il est donc nécessaire d'employer une approche itérative pour déterminer la solution du problème. Un calcul est d'abord mené pour une flamme purement gazeuse. Quand le calcul a convergé (tolérances pour la phase gazeuse respectées) et que la solution est obtenue en régime stationnaire, les calculs pour la phase liquide débutent. La solution obtenue pour la phase gazeuse est maintenue constante à chaque itération de temps pour le

calcul de la phase liquide. Les termes sources de la phase gazeuse en termes de masse, mouvement et énergie sont calculés pour chaque cellule de calcul qui a été traversée par les gouttes. La résolution des équations de la phase liquide permet de calculer la trajectoire, la température et la taille des gouttes (à chaque pas de temps). Cette boucle est répétée jusqu'à ce que la solution à l'état stationnaire soit atteinte pour le problème global. Rappelons que le nombre, la température et la taille des gouttes ont été imposés par l'utilisateur dans la zone fictive d'injection. Cette procédure est résumée sur la Figure 2.3.

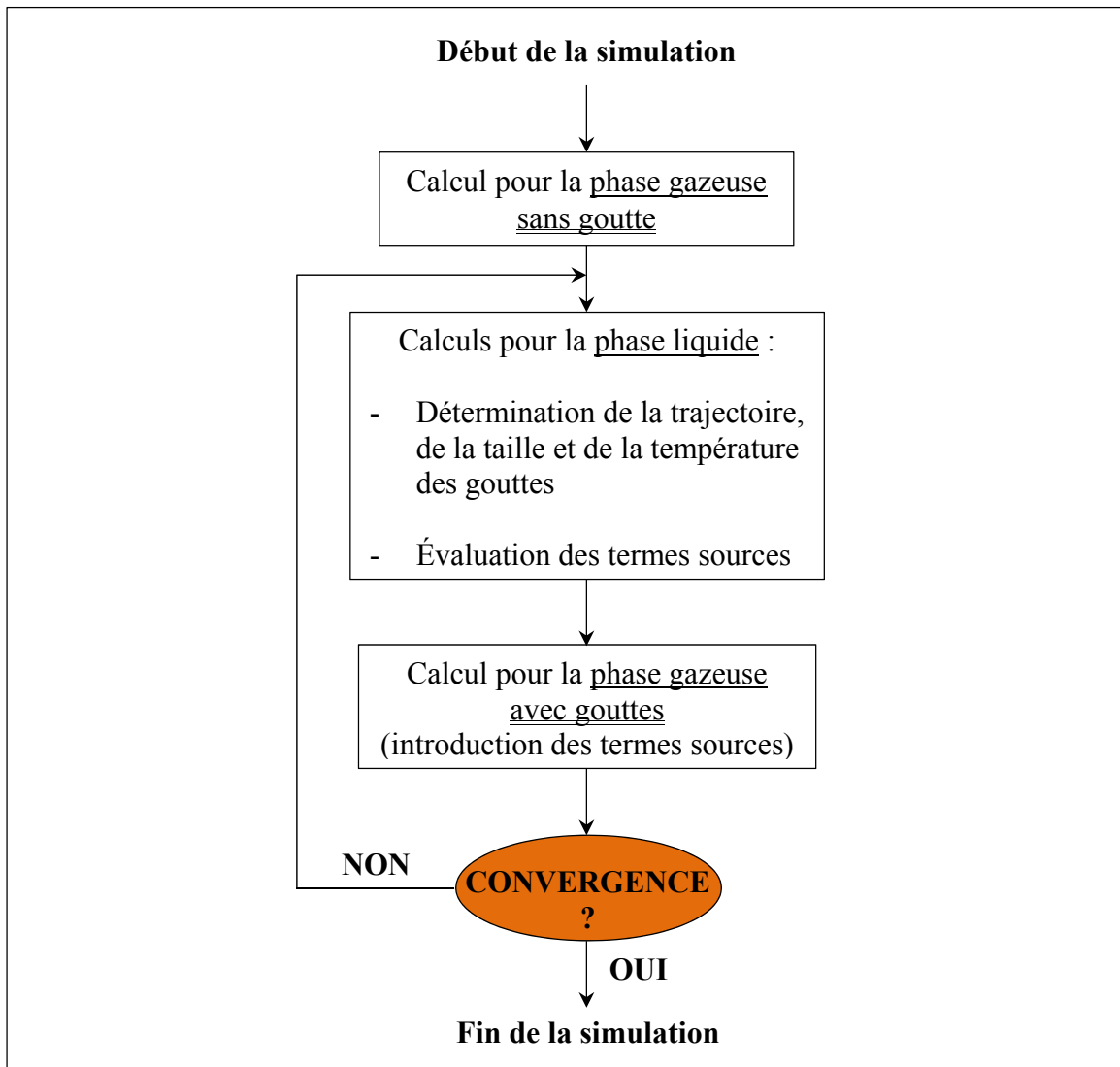


Figure 2.3 Schéma illustrant la procédure itérative de paramétrage du logiciel pour les cas diphasiques

2.4 Définition du modèle

Toute la difficulté d'une étude numérique réside dans la définition du modèle. Il est en effet essentiel de choisir des paramètres numériques conduisant à une solution indépendante du maillage. Une étude de sensibilité a ainsi été menée pour déterminer l'impact de chaque paramètre. Les résultats seront présentés dans les sections suivantes.

2.4.1 Incertitude des résultats

Comme l'a révélé la littérature étudiée, la question de la précision des résultats a bien souvent été occultée dans les études expérimentales (Hayashi et al. par exemple). Nomura et al. (2007), et Egolfopoulos, Du et Law (1992), notent une dispersion des données expérimentales de $\pm 10\%$ autour des valeurs moyennes. Ce problème d'incertitude des mesures expérimentales s'est déjà posé dans les études de flammes gazeuses : De Vries et al. (2011) parlent d'incertitudes de mesures entre 4,2 et 8,6% (selon la valeur de la richesse et de la pression initiale); Broustail (2012) note une variation entre des mesures successives inférieure à 1 cm/s dans ses expériences. Il sera ainsi important de prendre en compte ces incertitudes au moment des comparaisons à la littérature et de l'étude de sensibilité.

2.4.2 Étude de sensibilité pour flammes gazeuses

Dans cette partie, les principaux résultats de l'étude de sensibilité seront présentés. Nous analyserons l'influence du nombre de nœuds, de la longueur du domaine après et avant la flamme. À la fin de cette étude, un paramétrage optimal sera proposé. Celui-ci sera choisi de manière à respecter les conditions aux limites (énoncées plus haut). Le cas test qui a été choisi pour cette étude est celui d'une flamme gazeuse se propageant dans un mélange stœchiométrique à une pression de 1 bar et à une température de 300 K (cas de base).

Densité linéique de nœuds

Le choix du nombre de nœuds est soumis au choix de la longueur du domaine de calcul afin que les zones d'intérêt (le front de flamme notamment) puissent être discrétisées au mieux. Dans cette partie, il nous a semblé pertinent de nous ramener à la densité linéique de nœuds moyenne (calculée sur l'ensemble du domaine). Les simulations menées avec COSILAB ont amené aux résultats illustrés dans la Figure 2.4.

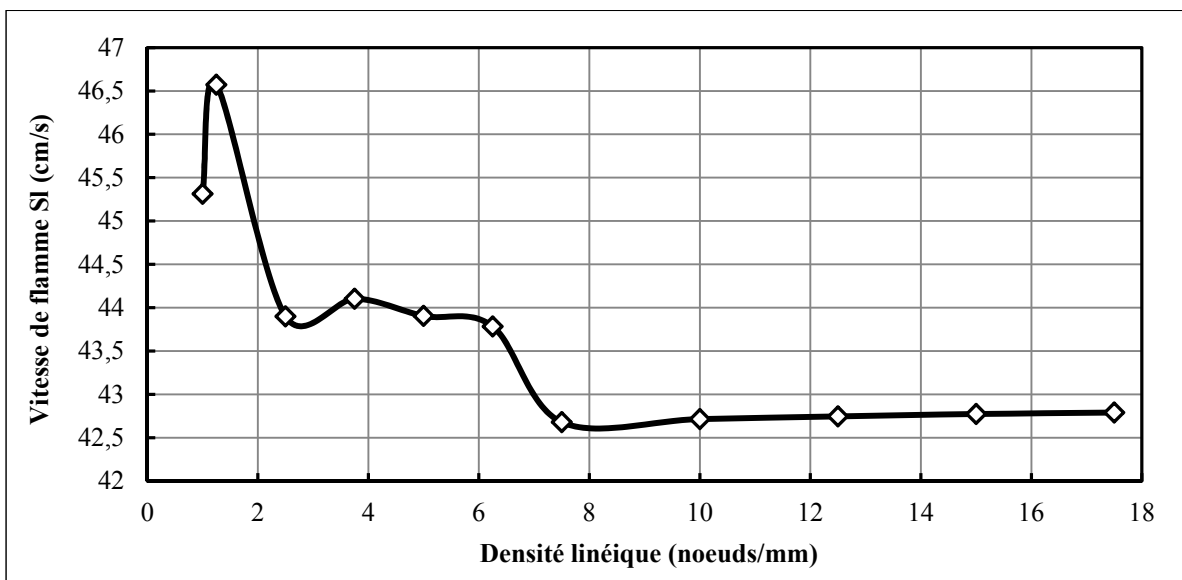


Figure 2.4 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la densité linéique de nœuds dans un maillage de 8 cm de long ($\phi = 1$; $P_u = 1$ bar et $T_u = 300$ K)

Cette évolution révèle que pour de faibles densités linéiques de nœuds, les écarts sont importants (supérieurs à 5%). Ensuite, le plateau présenté à partir de 10 nœuds/mm signifie qu'il n'est pas nécessaire d'augmenter la densité linéique. Les résultats numériques ne semblent plus influencés par ce paramètre. Sachant aussi que l'épaisseur d'un front de flamme peut varier entre 0,9 et 4 mm environ (Clarke et Hargrave, 2009), le critère de dix nœuds tous les millimètres paraît donc suffisant. Notons que les maillages testés dans cette partie sont raffinés autour de la flamme. La densité linéique locale de nœuds varie donc dans le domaine de calcul et est très élevée dans la flamme.

Longueur du domaine

Comme expliqué dans la section 2.2.2, pour étudier numériquement la propagation d'une flamme, le domaine de calcul doit être « assez grand » afin que ses frontières n'aient aucune influence sur les résultats. Dans cette partie, les effets de chaque frontière seront étudiés séparément. Pour que les analyses soient pertinentes, il a même été décidé de se fixer une densité linéique de nœuds : la valeur retenue ici s'élève à 100 nœuds/mm. Nous avons opté pour une densité élevée afin de nous assurer que la discrétisation soit optimale et qu'elle n'influence pas les résultats.

- Éloignement de la frontière chaude

Pour étudier l'effet induit par l'éloignement de la frontière chaude, la frontière froide a été fixée à environ 0,4 mm du point d'ancrage. Les résultats obtenus avec le logiciel COSILAB ont été restitués sur la Figure 2.5.

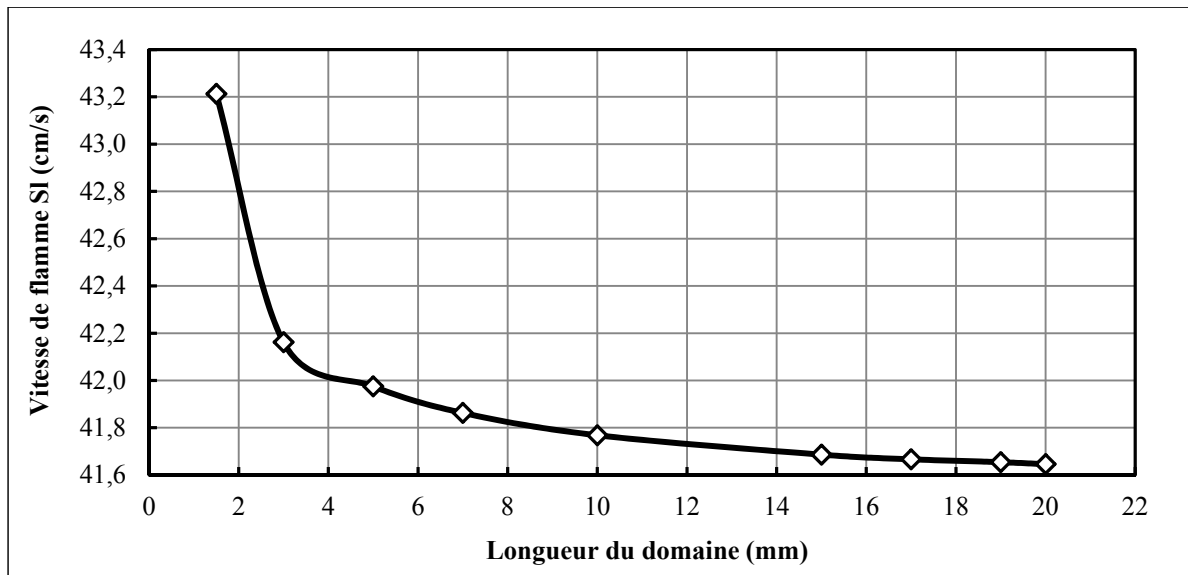


Figure 2.5 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la longueur du domaine ($\phi = 1$; $P_u = 1$ bar et $T_u = 300$ K)

L'écart maximal noté entre le premier et le dernier point de la courbe s'élève à environ 1,6 cm/s, soit 3,8% de la valeur obtenue pour le domaine le plus long. Les variations induites

par l'éloignement de la frontière chaude sont donc faibles. Dès 5 mm de longueur, la vitesse de flamme varie même de façon négligeable (écart inférieur à 1%). Du côté droit du domaine (frontière chaude), les processus physiques et chimiques postflammes étant principalement des processus de recombinaison, ils n'ont donc pas un impact marqué sur la vitesse et la structure de la flamme.

- Longueur de la zone avant flamme

Du côté gauche, la variation de la position de la frontière froide peut avoir un fort impact sur les résultats numériques (cf. manuel de COSILAB). En effet, comme expliqué précédemment, si la frontière froide est trop proche de la flamme, elle induit des pertes de chaleur artificielles qui faussent plus ou moins les résultats. Dans le cas étudié ici (cf. Figure 2.6), l'influence de la frontière froide sur la vitesse de flamme s'avère très faible.

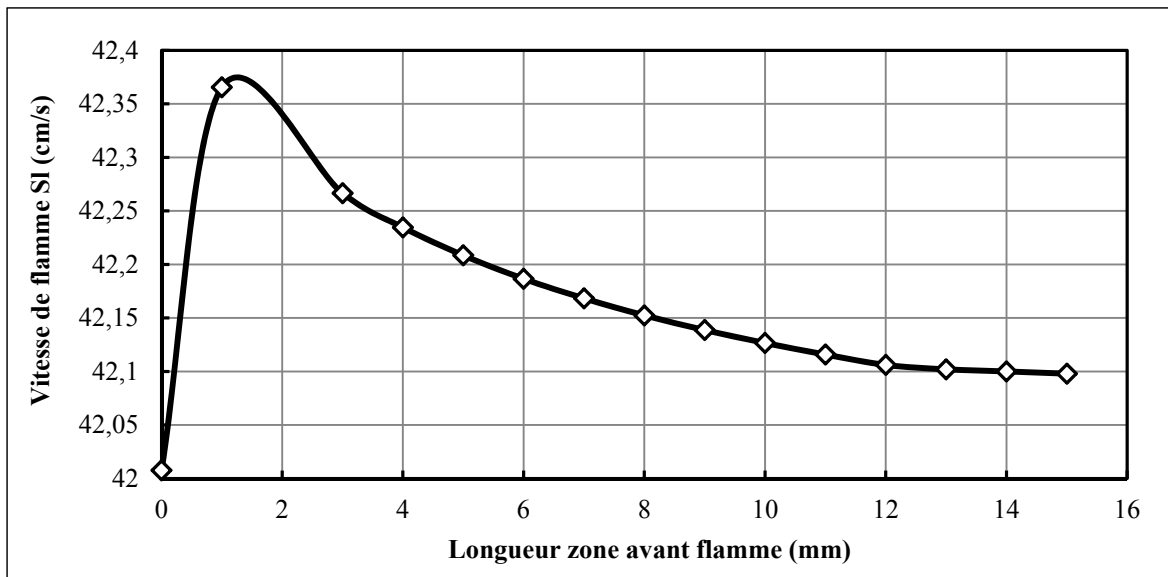


Figure 2.6 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la longueur de la zone en amont de la flamme ($\phi = 1$; $P_u = 1$ bar et $T_u = 300$ K)

Les deux premiers points de la courbe mettent en avant les pertes de chaleur artificielles induites par la proximité de la frontière froide. L'écart reste faible (inférieur à 1%) mais en observant l'allure des profils initiaux, nous avons pu constater un gradient important à la

frontière gauche lorsque celle-ci est à moins de 3 mm du point d'ancrage. La condition implicitement fixée dans COSILAB n'est donc pas respectée. Une longueur de 3 mm sera utilisée pour la suite.

2.4.3 Étude de sensibilité pour flammes diphasiques

En diphasique, le couplage des équations de la phase gazeuse avec celles de la phase liquide rend la convergence plus difficile à atteindre. Les paramètres numériques doivent donc être bien choisis. Une rapide étude de sensibilité a amené à des résultats relativement similaires à ceux du cas gazeux. Par exemple, la variation de la longueur du maillage a montré que l'influence de ce paramètre est plus importante dans les cas diphasiques. La variation maximale de la vitesse s'élève à près de 3% de la vitesse finale et dès 1 cm de longueur elle varie très peu (variation inférieure à 1%).

La présence de gouttes peut tendre à épaissir la flamme dans certaines conditions. Ce dernier point est donc à prendre en compte dans le dimensionnement du domaine. Pour être sûr d'être suffisamment loin des frontières, un domaine de plus de 1 cm de longueur sera ainsi privilégié. La frontière gauche sera éloignée d'environ 3 mm de la flamme. Le paramétrage du maillage a été établi en se basant sur les résultats obtenus pour une flamme purement gazeuse et assurant des marges de sécurité conséquentes. L'article de Neophytou et Mastorakos (2009) a également été pris comme référence pour le choix des dimensions du maillage, l'auteur utilisant lui aussi le logiciel COSILAB.

2.4.4 Injection des gouttes

Dans les études expérimentales analysées dans la revue de la littérature, les mélanges diphasiques sont uniformes. Les gouttes se forment donc plus ou moins loin du front de flamme. Avec COSILAB, l'utilisateur doit indiquer à quel endroit les gouttes sont introduites dans le mélange. Dans notre cas, nous avons décidé de nous situer dans la situation la plus critique : celle où les gouttes sont injectées très près du front de flamme. La distance a été choisie de manière à être au moins dix fois plus grande que les diamètres de

goutte étudiés ici. La valeur retenue a été de 0,4 mm, un choix arbitraire qui limite encore cette étude. Neophytou et Mastorakos (2009) ont montré que la longueur de préchauffage des gouttes influence peu les résultats numériques pour de petites gouttes. Lorsque le mélange diphasique a une richesse totale de 0,6 et des gouttes de 45 μm ils ont cependant constaté qu'entre une longueur de préchauffage de 2 mm et de 25 mm, la vitesse de flamme augmente de près de 20 %. Ceci semble cohérent avec la physique d'un tel milieu : plus la distance séparant les gouttes du front de flamme est grande, plus les grosses gouttes ont le temps de s'évaporer.

Les recherches antérieures ont aussi noté que les gouttes ayant $d_i > 40 \mu\text{m}$ s'évaporent lentement et brûlent après leur passage dans la flamme. D'après Greenberg, Silverman et Tambour (1996), pour les plus grosses gouttes et des mélanges riches, l'évaporation peut se poursuivre après la zone de combustion des gouttes. Les chercheurs parlent alors de « la zone de seconde évaporation ». Aux abords du front de flamme, notons également que les taux d'évaporation sont importants puisque, dans cette région, la température est plus élevée (influence du front de flamme).

2.5 Méthodologie de paramétrage

Avec le logiciel COSILAB, l'utilisateur a la possibilité de régler plusieurs paramètres numériques : ceux qui contrôlent le maillage adaptatif (CURV et GRAD), la résolution temporelle (incrément temporel, temps initial et final, ...) et le degré de convergence des calculs (tolérances). Afin de guider la convergence, l'utilisateur doit aussi indiquer l'allure des profils initiaux. La méthode de calcul utilisée pour ces profils sera détaillée dans la section 2.5.2 et l'ANNEXE VI.

2.5.1 Degré de convergence des calculs, résolution temporelle et spatiale

Pour assurer la convergence du calcul, lorsque les profils initiaux ne sont pas très précis, il est conseillé de choisir la méthode de Newton amortie (cf. le manuel utilisateur de COSILAB). Le réglage des tolérances permet de contrôler et réduire les résidus : les manuels

du logiciel conseillent notamment de prendre des tolérances relatives de $1E-4$ et des tolérances absolues de $1E-7$. La diminution trop excessive de ces tolérances n'apporte rien aux résultats. Bien au contraire, elle augmente considérablement les temps de calcul et rend difficile, voire impossible, la convergence des calculs. Quelques simulations ont été menées pour tester ces affirmations : les résultats concordent et les tolérances conseillées sont tout à fait adaptées pour les cas étudiés ici.

Au niveau de la discrétisation temporelle, il est important de choisir des paramètres permettant l'établissement du régime stationnaire. Au début des calculs avec la méthode de Newton en instationnaire, COSILAB utilise le pas de temps indiqué par l'utilisateur. À chaque itération réussie (ou convergée), COSILAB augmente quelque peu ce pas. On peut considérer que le régime stationnaire est atteint lorsque l'incrément de temps est suffisamment élevé (supérieur à une seconde) et que la convergence est toujours atteinte. Après plusieurs tests, il a finalement été choisi de fixer le pas de temps initial à une valeur de $1E-6$ s et le temps final à $5E+3$ s.

Pour ce qui est du maillage adaptatif, il est conseillé de choisir une tolérance de $2E-2$ et de diminuer progressivement le paramètre de courbure (CURV) et de gradient (GRAD). La tolérance permet de contrôler le degré de convergence du maillage. Comme expliqué plus haut, il est important que le maillage ait convergé à la fin des calculs. Les paramètres CURV et GRAD permettent de contrôler le nombre de points dans les zones de forte courbure et de fort gradient. Plus ces paramètres sont faibles, plus il y aura de points dans ces zones. Étant donnée l'allure des profils (cf. ANNEXE VI), il est essentiel que ces paramètres soient faibles. Il est en effet nécessaire d'avoir un maximum de mailles dans ces zones puisqu'elles correspondent au front de flamme. Divers tests ont montré que la diminution de ces paramètres a un impact sur les résultats. Les valeurs finales qui ont été retenues sont les suivantes : CURV = GRAD = $1E-2$ (valeurs couramment utilisées dans les tutoriels de COSILAB).

2.5.2 Profils initiaux

Dans COSILAB, l'utilisateur doit aussi saisir des profils initiaux pour faciliter la convergence. En effet, outre les conditions aux limites, il est important d'indiquer en entrée du logiciel quelle sera l'évolution spatiale approximative des grandeurs importantes :

- la fraction massique (ou molaire) du carburant,
- la fraction massique (ou molaire) des composants de l'air,
- la fraction massique (ou molaire) des produits majeurs de la combustion : H_2O , CO_2 et O_2 ,
- la fraction massique (ou molaire) des radicaux H , O et OH ,
- la température,
- le débit massique.

Pour les premiers calculs, il est conseillé de prendre peu de points afin de réduire les temps de calcul et pour les calculs intermédiaires, seule la convergence est recherchée. Les profils utilisés à la première itération sont issus de calculs approximatifs (cf. ANNEXE VI). Rappelons qu'à la fin de chaque calcul, il est nécessaire de vérifier que les conditions aux limites sont vérifiées et que les valeurs fixées par l'utilisateur sont atteintes avec une pente nulle ou très faible. Ce dernier point est en effet une condition fixée implicitement afin de garantir que le domaine est assez grand et que les frontières n'ont pas d'impact sur les résultats.

2.5.3 Procédure itérative de paramétrage en diphasique

Pour arriver à faire converger les calculs, une approche itérative a dû être adoptée. Pour simuler un cas diphasique, il faut compter plus de dix cas intermédiaires permettant de guider la convergence. À chaque itération, un paramètre bien particulier est modifié. Les profils obtenus à l'issue de la simulation du premier cas intermédiaire sont mis en entrée du second cas intermédiaire ... et ainsi de suite jusqu'au cas final.

Comme expliqué précédemment, pour s'assurer que le front de flamme est suffisamment discrétisé, il a été décidé d'augmenter le nombre de points dans le domaine et de diminuer les paramètres numériques contrôlant le raffinement du maillage adaptatif (CURV et GRAD). Cette étape dite « de raffinement » sera donc effectuée en dernier lieu. Les étapes de cette procédure ont été résumées sur la Figure 2.7.

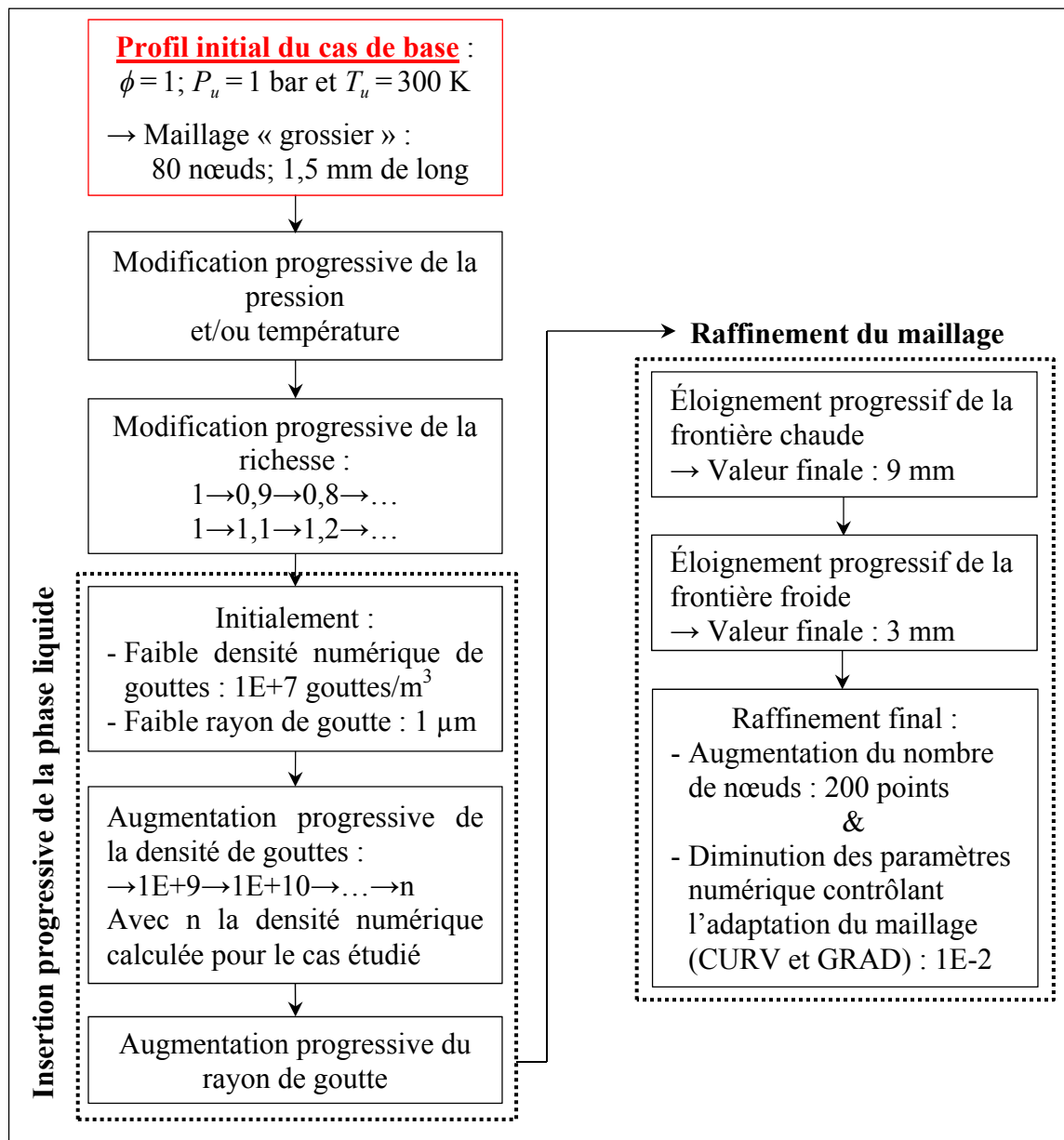


Figure 2.7 Schéma illustrant la procédure itérative de paramétrage du logiciel pour les cas diphasiques

Pour les cas gazeux, la même procédure est suivie, seules les étapes d'insertion de la phase liquide ne sont pas nécessaires.

Concernant les temps de calcul, il est à noter que la simulation d'un cas de flamme gazeuse peut prendre jusqu'à 1 heure, alors que celle d'un cas diphasique peut durer jusqu'à 7 heures. Les écarts viennent du fait que pour les flammes diphasiques la convergence est difficile et longue. Il est nécessaire de faire de nombreux calculs intermédiaires pour guider les calculs et assurer leur convergence. Notons aussi que les temps de calcul obtenus restent relativement faibles, même pour les cas diphasiques. Le paramétrage choisi ici nous permet donc d'obtenir des résultats dans des temps raisonnables. Finalement, précisons que les simulations ont été effectuées avec un ordinateur fonctionnant sous l'environnement Windows et utilisant le processeur Intel® Xeon® E5405 (4 Go de RAM et 2 GHz de fréquence).

2.6 Validation

Pour valider les modèles implémentés sous COSILAB, une étude comparative a été menée. Les résultats expérimentaux et numériques obtenus dans des études antérieures ont servi de référence. Comme expliqué au chapitre 1, les résultats expérimentaux présentent cependant des disparités relativement importantes et certaines études restent peu explicites sur les conditions expérimentales. Les ordres de grandeur et les tendances générales seront donc au cœur de cette étude de validation.

2.6.1 Validation de la cinétique utilisée

La validation de Marinov est illustrée à la Figure 2.8, où plusieurs courbes expérimentales montrant l'évolution de S_L en fonction de ϕ pour un prémélange gazeux (air/éthanol) ont été superposées à la courbe obtenue numériquement grâce au modèle de notre étude.

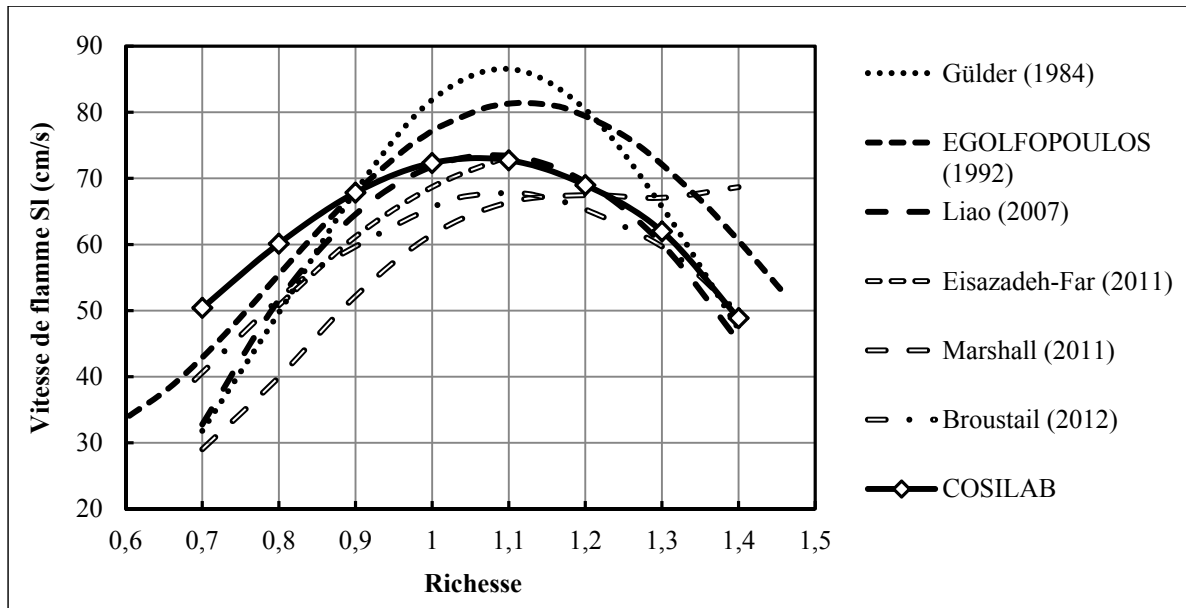


Figure 2.8 Évolution de S_L en fonction de ϕ pour des prémélanges gazeux à $P_u = 1$ bar & $T_u = 423$ K - Comparaison de la tendance du modèle à des tendances expérimentales tirées de la littérature

La Figure 2.8 révèle des résultats expérimentaux très disparates. Des écarts de près de 20 cm/s peuvent être constatés dans certains cas. À ce propos, Broustail (2012) explique ces écarts par des différences dans les techniques expérimentales de mesure : Broustail (2012) utilise par exemple la méthode Schlieren pour ses essais alors que Gulder (1984) utilise des sondes à ionisation. Pour des mélanges riches (ϕ entre 1 et 1,4), la courbe obtenue avec le modèle est presque confondue avec celle de Liao et al. (2007). À contrario, pour les mélanges pauvres, les deux courbes s'éloignent. Dès que ϕ devient inférieure à 0,9, la courbe du modèle passe au-dessus de toutes les autres courbes. Pour une richesse de 0,7, l'écart entre Liao et al. (2007) et le modèle est élevé : environ 20 cm/s. Il est néanmoins important de ne pas oublier de prendre en compte les incertitudes des courbes expérimentales lors des comparaisons. Comme expliqué à la section 2.4.1, la dispersion des données expérimentales s'élève à $\pm 10\%$ dans certaines études (Egolfopoulos, Du et Law, 1992; Nomura et al., 2007), or on peut constater que les écarts entre les résultats expérimentaux et ceux du modèle restent inférieurs à 10% pour des richesses faibles (sauf à 0,7). Les résultats du modèle s'inscrivent donc dans l'intervalle d'incertitude des résultats expérimentaux à ces richesses.

Dans le chapitre 3, les résultats expérimentaux de Hayashi et Kumagai (1975), Hayashi, Kumagai et Sakai (1976), et Nomura et al. (2000; 2007) seront souvent pris comme éléments de comparaison. Les tendances numériques obtenues pour des prémélanges gazeux seront donc également confrontées aux tendances de ces études expérimentales. Comme expliqué dans le chapitre 1, les articles de Nomura et al. et d'Hayashi et al. restent cependant très vagues sur les conditions expérimentales. Sur la Figure 2.9 les tendances expérimentales sont superposées à celles obtenues numériquement pour une pression de 2 bar (la même que celle de Nomura et al. (2000)) et une température de 300 K (valeur fixée arbitrairement et comprise dans l'intervalle de Nomura et al. (2000)). La vitesse de flamme adimensionnelle est obtenue en divisant la vitesse de flamme par la vitesse de flamme maximale obtenue dans chaque étude.

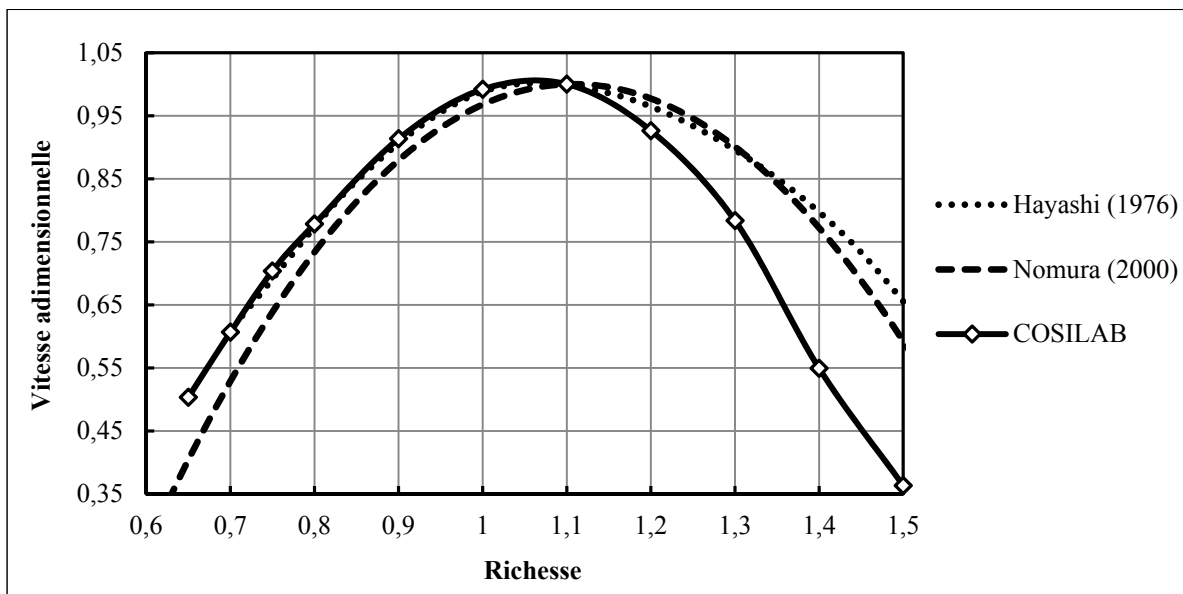


Figure 2.9 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ pour des prémélanges gazeux à $P_u = 2$ bar & $T_u = 300$ K - Comparaison de la tendance du modèle aux tendances expérimentales, tirées de Hayashi et al. (1976) et de Nomura et al. (2000)

La Figure 2.9 montre que les résultats numériques concordent avec les résultats expérimentaux et surtout avec ceux obtenus par Hayashi, Kumagai et Sakai (1976). En effet, jusqu'à une richesse de 1,2 les écarts entre les deux courbes restent inférieurs à 5%. Les résultats de Nomura et al. (2000), quant à eux, sont plus éloignés des résultats numériques.

Ils restent inférieurs à 5% pour ϕ entre 0,8 et 1,2. Pour les mélanges très riches, les tendances s'éloignent cependant.

Au final, le choix de la cinétique de Marinov est confirmé car celle-ci est fidèle aux résultats expérimentaux. Les écarts constatés par rapport à la littérature sont considérés satisfaisants en considérant la dispersion des résultats expérimentaux.

2.6.2 Validation du modèle d'évaporation de goutte

Comme indiqué dans la section 2.2.3, le modèle d'évaporation utilisé ici est celui d'Abramzon et Sirignano (1989). Dans leur article, ces chercheurs expliquent que leur modèle est utilisable pour une grande variété de tailles de gouttes et de nombres de Reynolds. Il convient tout à fait à la simulation des problèmes de propagation de flamme en milieu diphasique. Ce modèle, à la base des études d'évaporation de gouttes, est très souvent utilisé. Il a largement été validé et propose une bonne approximation de la réalité (Sazhin et al., 2006).

2.7 Bilan

Dans la première partie de ce chapitre, consacrée à la théorie du modèle, plusieurs éléments ont été détaillés :

- les hypothèses simplificatrices adoptées,
- les équations principales pour chaque phase accompagnées de leurs conditions aux limites,
- la cinétique utilisée avec la méthode de calcul des propriétés thermophysiques,
- la formulation numérique du problème étudié et la méthode numérique utilisée,
- la procédure de calcul suivie pour résoudre un problème diphasique.

Ce développement nous a permis de définir les limites du modèle et de mieux comprendre les phénomènes mis en jeu.

La démarche de paramétrage du modèle a ensuite été détaillée. Les paramètres finalement retenus sont les suivants :

- Longueur de maillage : 1,2 cm
- Position de la limite froide : à 3 mm du point d'ancrage
- Densité moyenne de nœuds (sur l'ensemble du domaine de calcul) : plus de 10 nœuds/mm
- Tolérances relatives et absolues : respectivement, $1E-4$ et $1E-7$
- Paramètres de raffinement du maillage (CURV et GRAD) : $1E-2$

Ces valeurs ont été choisies de manière à obtenir des résultats respectant les conditions aux limites du problème, tout en permettant un bon compromis « précision/temps de calcul ». La détermination de ces paramètres a été réalisée en se basant sur les résultats issus de l'étude de sensibilité et en s'inspirant de l'étude de Neophytou et Mastorakos (2009). Avec le maillage final contenant 200 nœuds au total, les conditions de gradient nul aux frontières sont vérifiées et le front de flamme est largement discrétisé : la densité linéique de nœuds dans la zone de la flamme (dont l'épaisseur reste inférieure à 0,5 mm dans les cas testés ici) est en moyenne de 180 nœuds/mm. Au cours de ce second chapitre, une procédure itérative de paramétrage a aussi été expliquée en détails. Celle-ci vise à guider la convergence pour les cas diphasiques et ainsi à réduire les temps de calcul. Le seul inconvénient de cette procédure est qu'elle oblige l'utilisateur à découper son calcul en plusieurs sous-calculs intermédiaires.

Enfin, les comparaisons faites dans la dernière partie de ce chapitre laissent apparaître d'ores et déjà des écarts entre les résultats du modèle et ceux de la littérature. Cependant, la littérature elle-même révélait déjà des incertitudes. Après cette validation, le modèle semble mener à des résultats reproduisant qualitativement et quantitativement les mesures expérimentales. On peut donc en déduire que ce modèle est validé. Le modèle monodimensionnel développé dans cette étude semble répondre pleinement au premier sous-objectif puisqu'il a été validé en utilisant les résultats collectés dans la littérature. Dans le prochain chapitre, ce modèle sera utilisé en milieu diphasique et nous ferons l'hypothèse qu'il est aussi valide dans ce type de mélanges. Les comparaisons à la littérature faites dans le chapitre 3 permettront de valider cette hypothèse.

CHAPITRE 3

RÉSULTATS NUMÉRIQUES

3.1 Introduction

Dans ce dernier chapitre, les résultats numériques obtenus avec COSILAB seront présentés et comparés à ceux de la littérature. Une analyse de l'influence de la variation des paramètres physiques sera effectuée. La richesse totale (ϕ_o), la richesse liquide (ϕ_l), le diamètre initial des gouttes (d_i) et la pression des gaz frais (P_u) seront les paramètres d'étude. À l'issue de ce chapitre, une corrélation sera proposée afin de reproduire les comportements observés.

3.2 Résultats numériques

Dans cette section, les tendances adimensionnelles décrites par S_L seront tout d'abord comparées à celles de la littérature. Pour expliquer ces évolutions, les analyses s'attarderont ensuite sur les changements de structure du front de flamme et l'évolution de l'évaporation des gouttes. Le Tableau 3.1 fait la liste des cas qui seront analysés en détails ici. La température des gaz frais (T_u) n'est pas indiquée pour ne pas alourdir le tableau mais notons que dans tous les cas étudiés elle sera égale à 300 K.

Tableau 3.1 Liste des cas simulés avec le modèle

	Paramètre variable secondaire	Paramètres fixés		
S_L vs ϕ_o	ϕ_ℓ	$d_i = 4 \mu\text{m}$	$P_u = 2 \text{ bar}$	Cf. section 3.2.2
	d_i	$\phi_\ell = 0,07$	$P_u = 2 \text{ bar}$	
	P_u	$\phi_\ell = 0,2$	$d_i = 8 \mu\text{m}$	
S_L vs ϕ_ℓ	d_i	$\phi_o = 0,8$	$P_u = 2 \text{ bar}$	Cf. section 3.2.3
	d_i	$\phi_o = 1,2$	$P_u = 2 \text{ bar}$	
S_L vs d_i	ϕ_ℓ	$\phi_o = 0,8$	$P_u = 2 \text{ bar}$	Cf. section 3.2.4
	ϕ_ℓ	$\phi_o = 1,2$	$P_u = 2 \text{ bar}$	
S_L vs P_u	ϕ_o	$\phi_\ell = 0,2$	$d_i = 8 \mu\text{m}$	Cf. section 3.2.5

3.2.1 Épaisseur de flamme et richesse effective

L'étude de l'influence des gouttes sur la vitesse de flamme amène à des conclusions assez variées. Au chapitre 1, il a été établi que certaines évolutions pouvaient être dues à un changement de la structure du front de flamme (épaississement) et du taux d'évaporation. Dans ce chapitre, nous analyserons donc l'effet des conditions de mélange (ϕ_o , ϕ_ℓ , d_i et P_u) sur la structure de la flamme et sur l'évaporation des gouttes. L'épaisseur de flamme sera la grandeur utilisée pour caractériser la structure de la flamme, alors que la richesse effective sera celle utilisée pour l'évaporation.

Épaisseur de flamme

Dans leurs articles, Hayashi et al. (1975; 1976) et Nomura et al. (2007) expliquent que la présence de gouttes peut induire une modification de la structure du front de flamme. Il a donc semblé intéressant d'étudier l'évolution de l'épaisseur de flamme dans un milieu

diphase pour déterminer si le front de flamme subit aussi un changement de structure sur le plan numérique.

L'épaisseur de flamme est un des paramètres les plus utilisés pour caractériser les processus qui se déroulent durant la combustion. Il existe plusieurs définitions de cette grandeur, celle de Spalding (1955) sera utilisée dans cette étude. Cette définition se retrouve très souvent dans la littérature : dans leur étude Hu et al. (2014) utilisent, par exemple, cette définition pour calculer l'épaisseur de flamme et surveiller l'impact de l'ajout de CO_2 sur la structure de la flamme. L'épaisseur de flamme y est définie comme le ratio entre la différence maximale de température et le gradient maximal de température qui apparaît au point d'inflexion (cf. Figure 3.1) :

$$\delta_L = \frac{T_b - T_u}{\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_{\max}} \quad (3.1)$$

avec T_b la température des gaz brûlés (température maximale); T_u celle des gaz frais; et $(\partial T/\partial y)_{\max}$ le gradient maximal de température. Elle correspond à l'épaisseur diffusive (Bougrine et al., 2011) et est inversement proportionnelle à la vitesse de flamme et à la pression (Turns, 2000). La Figure 3.1 permet de mieux se représenter ce qu'est δ_L .

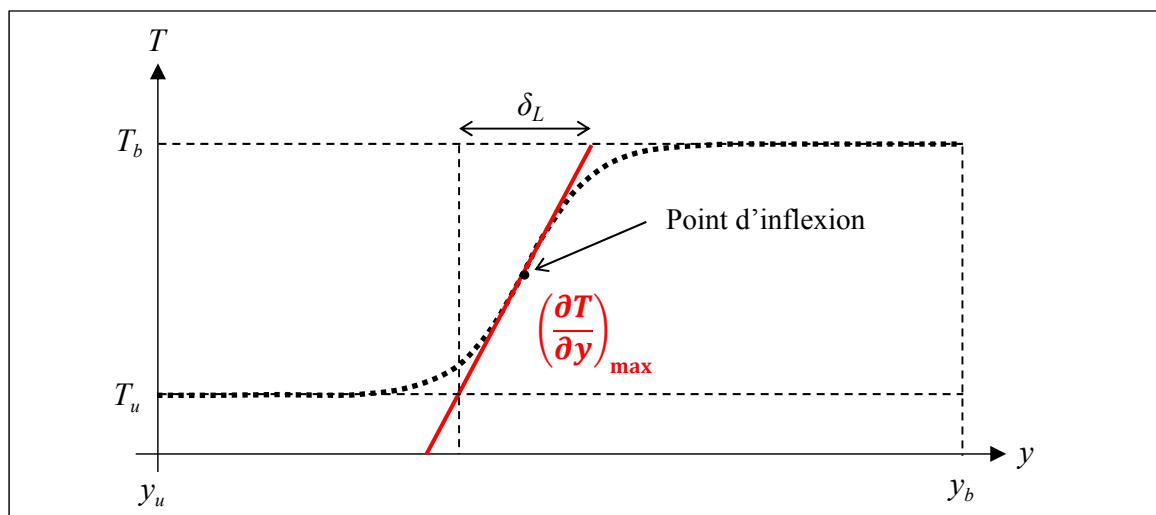


Figure 3.1 Schéma illustrant la définition de l'épaisseur de flamme

Richesse effective

Comme expliqué dans la littérature, la variation de S_L peut être en partie due à l'évaporation tardive des grosses gouttes. En effet, dans le cas où les gouttes ne s'évaporent pas totalement en amont de la flamme, la richesse gazeuse dans la zone de réaction est plus faible que la richesse totale du mélange, ce qui induit un changement de S_L . Dans la littérature, cette richesse est appelée la « richesse effective » (Ballal et Lefebvre, 1981; Hayashi, Kumagai et Sakai, 1976; Neophytou, 2010). Elle est définie comme la richesse gazeuse dans la zone où les réactions s'intensifient. Dans notre étude, nous avons choisi de nous inspirer de cette définition. La richesse effective correspond donc au ratio de la fraction massique totale de carbone calculée à l'endroit où l'on obtient le pic de dégagement d'énergie (caractéristique du front de flamme), Y_C , sur la fraction massique totale de carbone calculée pour les gaz frais à la stœchiométrie, $Y_{C,st}$. Elle se note comme suit :

$$\phi_{eff} = \frac{Y_C}{Y_{C,st}} \quad (3.2)$$

Cette formule ne correspond pas vraiment à la définition de la richesse donnée au chapitre 1 puisqu'elle ne prend pas en compte la fraction massique d'air. Elle permet simplement d'obtenir une valeur approximative de la richesse dans la zone de réaction, comme l'explique Neophytou (2010).

3.2.2 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse totale

Dans cette section, les tendances décrites par S_L en fonction de ϕ_o seront analysées et comparées à celles de la littérature. Pour chaque cas, la structure de la flamme et l'évaporation des gouttes seront étudiées afin de cerner les changements induits par la modification des conditions de mélange.

Influence de la richesse liquide

Une étude de l'influence de la variation de ϕ_ℓ a tout d'abord été engagée pour des petites gouttes ($d_i = 4 \mu\text{m}$). Les résultats ont été rassemblés sur la Figure 3.2. La vitesse adimensionnelle a été obtenue en divisant S_L par $S_{L,max}$ obtenue pour un prémélange gazeux d'une richesse totale de 1,1 et s'élevant à 36,2 cm/s.

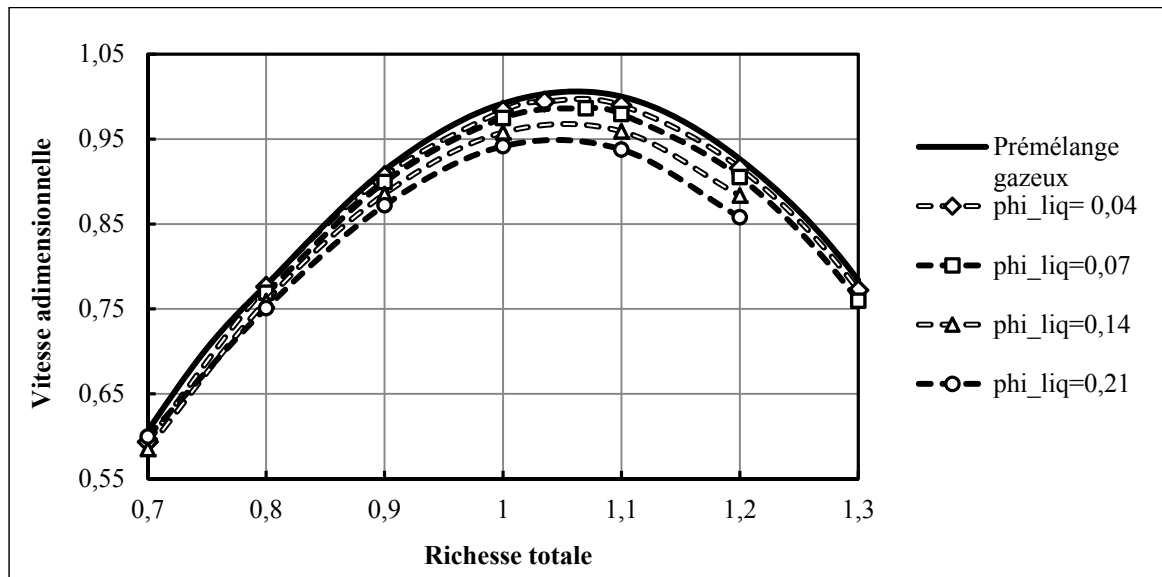


Figure 3.2 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2 \text{ bar}$, ϕ_ℓ entre 0,04 et 0,21 et $d_i = 4 \mu\text{m}$, et pour des prémélanges gazeux

La superposition des courbes montre que l'influence de ϕ_ℓ est faible pour de petites gouttes : $S_{L,max}$ diminue peu lorsqu'on augmente ϕ_ℓ . L'influence des gouttes est d'ailleurs plus marquée autour de la stœchiométrie. On peut ensuite noter que ϕ_o^{max} ne change pas avec le modèle. Afin de comparer les résultats du modèle aux résultats expérimentaux, les tendances adimensionnelles d'Hayashi et Kumagai (1975) et du modèle pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 4 \mu\text{m}$ et $\phi_\ell \leq 0,14$ ont été rassemblées sur la Figure 3.3.

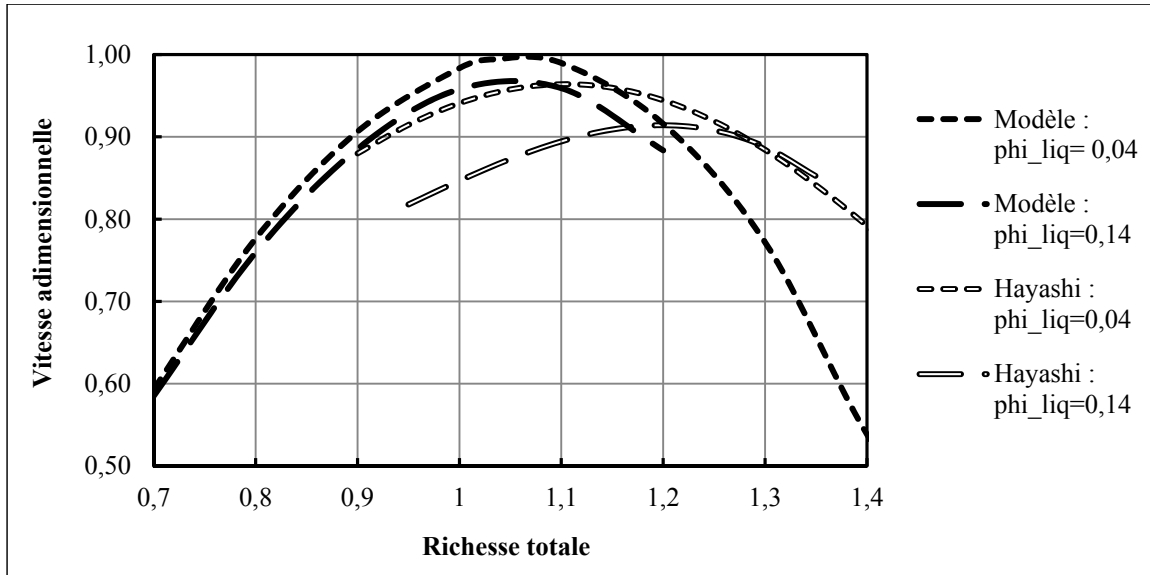


Figure 3.3 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Hayashi et al. (1975) à ceux du modèle avec $d_i = 4 \mu\text{m}$ et $\phi_\ell \leq 0,14$

La Figure 3.3 montre tout d'abord que la tendance du modèle ressemble à celle obtenue par Hayashi et Kumagai (1975). À $\phi_\ell = 0,04$, les deux courbes atteignent leur maximum pour des mélanges légèrement riches et les ordres de grandeur concordent. La diminution à faible et haute richesse totale est cependant beaucoup plus marquée avec le modèle. La superposition des courbes a aussi révélé que l'influence des gouttes est plus marquée dans l'étude expérimentale. À $\phi_o = 1$, par exemple, on peut noter une diminution d'environ 10% de la vitesse adimensionnelle quand ϕ_ℓ passe de 0,04 à 0,14 pour Hayashi et Kumagai (1975) alors que cette diminution n'est que de 4% pour le modèle. Les résultats expérimentaux présentent aussi une augmentation de ϕ_o^{max} quand ϕ_ℓ augmente, ce qui est contraire aux résultats du modèle. La variation de la température dans les études expérimentales pourrait expliquer les différences constatées ici. Si la température avait été constante, l'influence des gouttes serait probablement moins marquée puisque, comme l'explique Kuo (1986), la vitesse de flamme est directement fonction de T_u^β (avec $\beta > 1$). Par contre, dans les études de Nomura et al. (2000; 2007), les courbes sont décalées vers les richesses faibles (cf. chapitre 1) ce qui entre en contradiction avec les tendances d'Hayashi et al. et du modèle.

Pour expliquer leurs tendances, Hayashi et Kumagai (1975) ont analysé la structure de la flamme et l'état d'évaporation des gouttes. Leurs observations les ont amené à conclure que l'influence des gouttes est probablement due à une évaporation tardive des gouttes. Du côté de la structure de la flamme, les auteurs précisent que pour des gouttes de ce diamètre, la structure de la flamme reste proche de celle de la flamme gazeuse. À l'instar d'Hayashi et Kumagai (1975), nous étudierons la structure de la flamme et examinerons l'état d'évaporation des gouttes.

- Structure de la flamme

Au niveau de l'épaisseur de flamme les tendances sont inverses à celles obtenues pour S_L . Ce premier constat est conforme à l'expression de δ_L obtenue par Turns (2000) :

$$\delta_L = \frac{2\alpha}{S_L} \quad (3.3)$$

Où $\alpha = k/(\rho_u c_p)$ est la diffusivité thermique du mélange gazeux avec la conductivité thermique, k , et la chaleur spécifique, c_p , calculées à la température moyenne $(T_u + T_b)/2$ et ρ_u , la masse volumique du mélange frais.

Pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 4 \mu\text{m}$ et $\phi_\ell \leq 0,21$, δ_L varie très peu par rapport à $\delta_{L,gaz}$. Pour ϕ_o entre 0,8 et 1,4, nous avons pu noter des variations comprises entre 0,1 et 4,9 μm . L'écart relatif maximal s'élève alors à 2,3%. Le faible changement de la structure de la flamme, à faible richesse liquide et à faible diamètre de gouttes, est bien confirmé. Un tel constat est conforme aux prévisions expérimentales d'Hayashi et al. (1975). Les courbes étant quasiment confondues, elles n'ont pas été représentées ici.

- Évaporation des gouttes

Pour les mélanges diphasiques étudiées ici, la richesse effective obtenue est très proche de la richesse totale ce qui semble signifier que les gouttes se sont évaporées complètement en amont de la flamme. Sur ce point le modèle ne concorde pas avec les observations d'Hayashi et Kumagai (1975) ce qui pourrait expliquer en partie les différences obtenues avec S_L .

Influence du diamètre initial des gouttes

L'influence de la taille des gouttes a ensuite été analysée. La Figure 3.4 rassemble les tendances adimensionnelles obtenues pour des mélanges diphasiques avec $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour des prémélanges gazeux équivalents. Ici, la vitesse adimensionnelle a été calculée de la même façon qu'à la Figure 3.2.

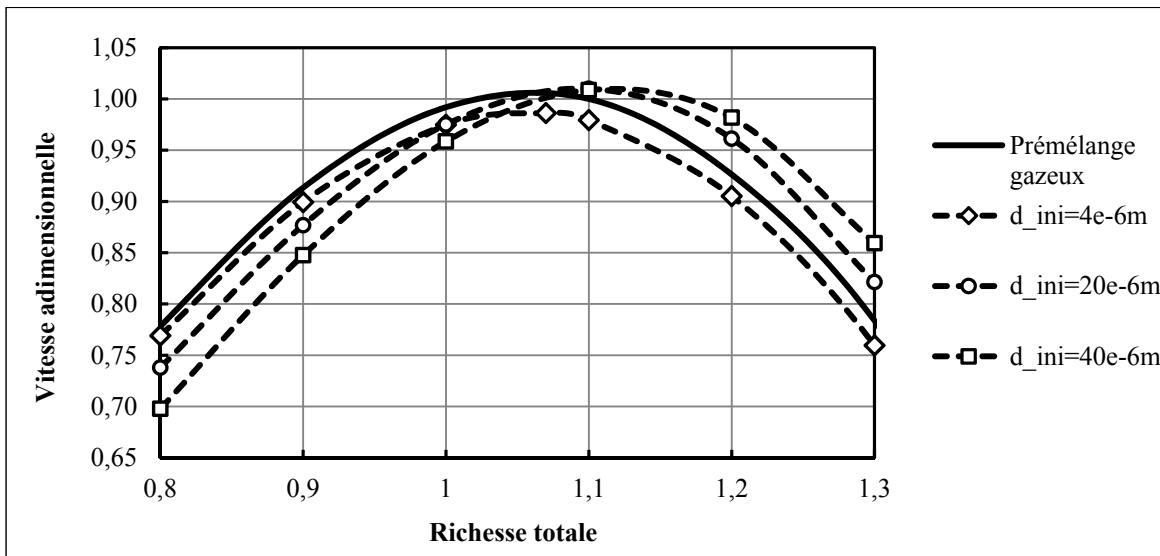


Figure 3.4 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour des prémélanges gazeux

Sur la Figure 3.4, ϕ_o^{max} et $S_{L,max}$ tendent à augmenter quand d_i augmente. Le croisement des courbes signifie que selon ϕ_o les changements induits par l'augmentation de d_i sont différents (ce qui sera vu au début de la section 3.2.4).

Cette tendance ne correspond pas tout à fait aux résultats expérimentaux d'Hayashi, Kumagai et Sakai (1976). Comme le montre la Figure 3.5, avec Hayashi et al. ϕ_o^{max} ne change, ce qui n'est pas le cas avec le modèle. Pour $S_{L,max}$, par contre, les tendances concordent : $S_{L,max}$ augmente quand ϕ_ℓ augmente. Les observations expérimentales ont montré que ces évolutions sont dues à un changement de structure du front de flamme.

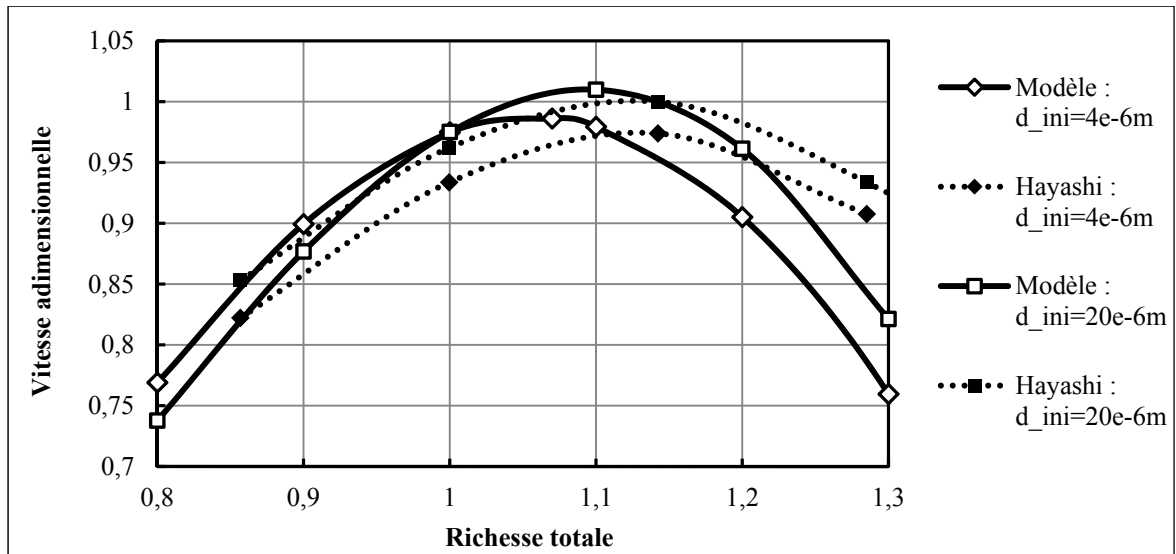


Figure 3.5 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Hayashi et al. (1976) à ceux du modèle avec $d_i \leq 20 \mu m$ et $\phi_\ell = 0,07$

- Structure de la flamme

La Figure 3.6 rassemble les tendances décrites par δ_ℓ en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour les prémélanges gazeux équivalents.

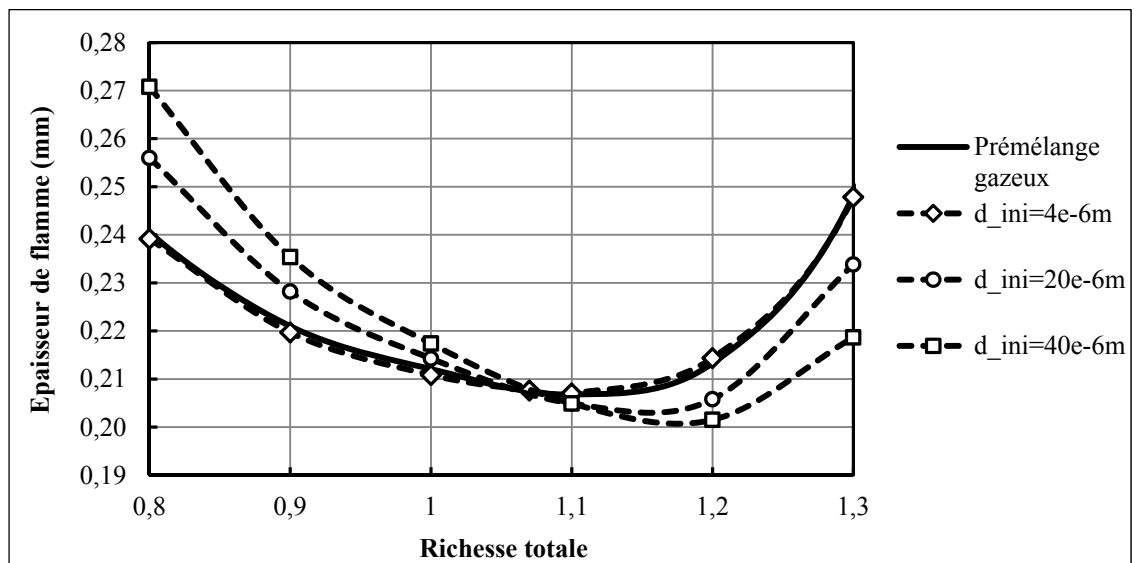


Figure 3.6 Évolution de l'épaisseur de flamme en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2 \text{ bar}$, $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour des prémélanges gazeux

Les tendances de la Figure 3.6 confirment que l'augmentation de d_i entraîne une modification de la structure de la flamme. Pour les mélanges pauvres, la flamme tend à s'épaissir quand d_i augmente alors que c'est le contraire pour des mélanges riches. Les variations maximales sont d'environ $30 \mu\text{m}$ (soit 12,6 % de $\delta_{L,gaz}$) pour les plus grosses gouttes. Notons que pour des petites gouttes ($d_i = 4 \mu\text{m}$), par contre, $\delta_{L,diph}$ reste très proche de $\delta_{L,gaz}$. Par la suite, les tendances obtenues pour δ_L ne seront plus détaillées puisque celles-ci sont simplement inverses à celles de S_L .

- Évaporation des gouttes

Concernant l'évaporation des gouttes, ϕ_{eff} reste proche de ϕ_o pour de petites gouttes alors qu'elle tend à diminuer pour de grosses gouttes. La Figure 3.7 illustre l'évolution de ϕ_{eff} en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec d_i entre 20 et 40 μm et $\phi_\ell = 0,07$. Notons que la ligne en trait plein symbolise le cas de référence, celui où l'évaporation peut être considérée comme complète en amont de la flamme et où $\phi_{eff} = \phi_o$.

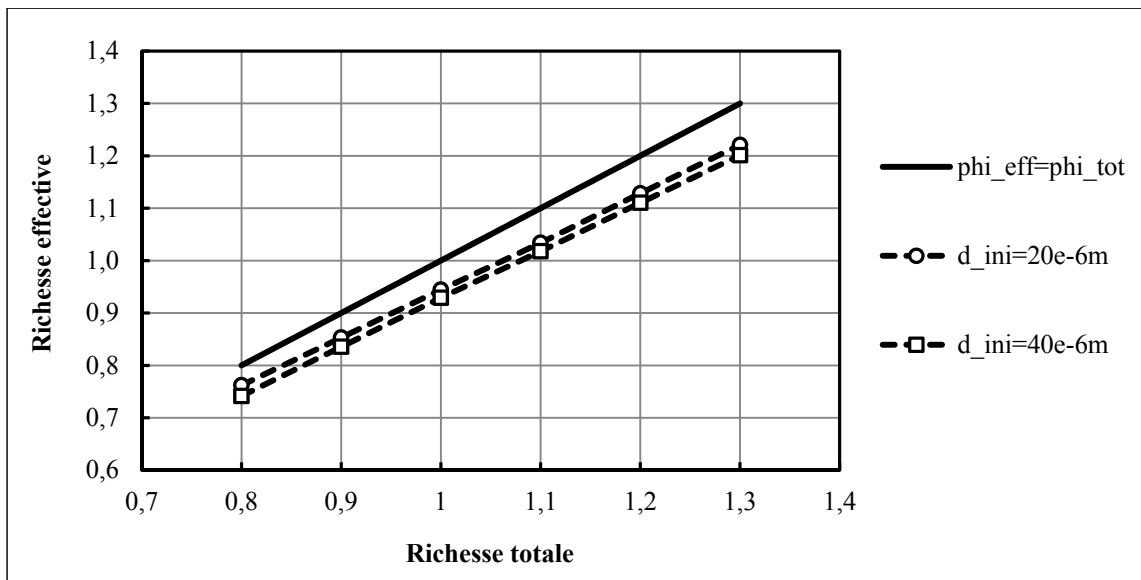


Figure 3.7 Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2 \text{ bar}$, $\phi_\ell = 0,07$ et d_i entre 20 et 40 μm

La Figure 3.7 confirme que l'augmentation de d_i conduit à une diminution de ϕ_{eff} et montre que cette diminution est plus marquée pour les mélanges riches. Pour $\phi_o = 1,3$, par exemple, l'écart entre ϕ_{eff} et ϕ_o est proche de ϕ_ℓ ce qui pourrait signifier que dans le cas de grosses gouttes l'évaporation n'a pu se faire en amont de la flamme. La pénétration des gouttes dans la flamme expliquerait ainsi la variation de la structure du front de flamme.

Influence de la pression des gaz frais

Le dernier paramètre étudié dans cette section est P_u . La Figure 3.8 réunit les tendances adimensionnelles obtenues pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar, et pour des prémélanges gazeux équivalents. Pour les mélanges diphasiques, les cas riches ont été peu étudiés car ils ont posé quelques problèmes de convergence. Ce point serait à améliorer dans une future étude sur le sujet.

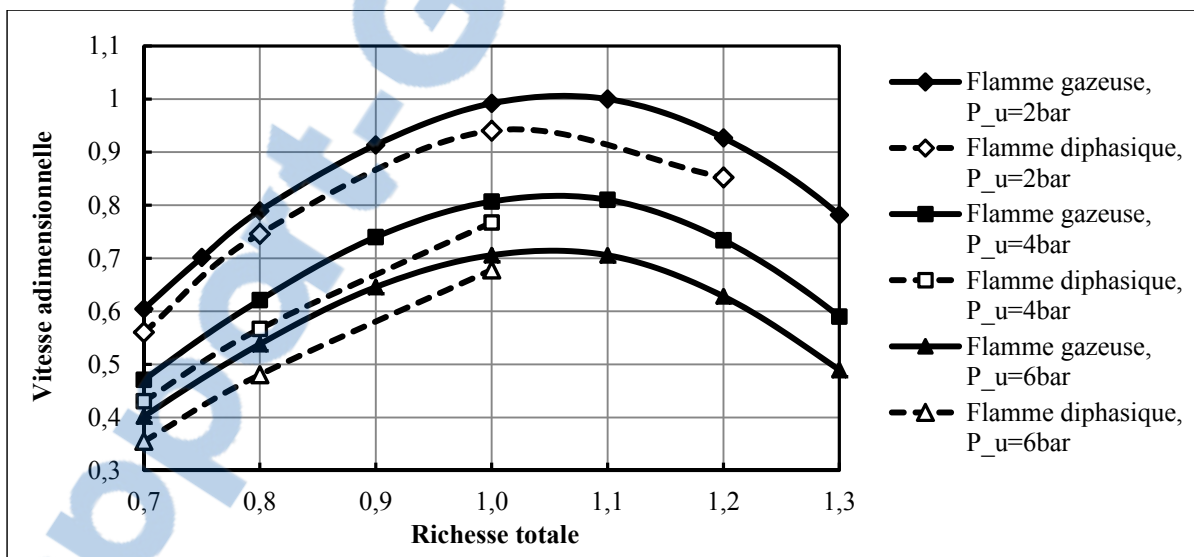


Figure 3.8 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar, et pour des prémélanges gazeux

Sur la Figure 3.8, on retrouve la forme de parabole inversée pour les flammes gazeuses. Dans les cas diphasiques, la plage de richesse totale, trop restreinte, ne permet pas de retrouver cette tendance, sauf pour la flamme diphasique à 2 bar. Pour celle-ci, on peut d'ailleurs remarquer que $S_{L,max}$ reste inférieure à celle obtenue pour un mélange gazeux équivalent. Sur

ce point, le modèle rejoint les constatations expérimentales de Nomura et al. (2007). On peut ensuite noter que S_L diminue quand P_u augmente et $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$ pour toutes les pressions et les richesses totales testées. La Figure 3.9 permet la comparaison des tendances du modèle à celles de Nomura et al. (2007).

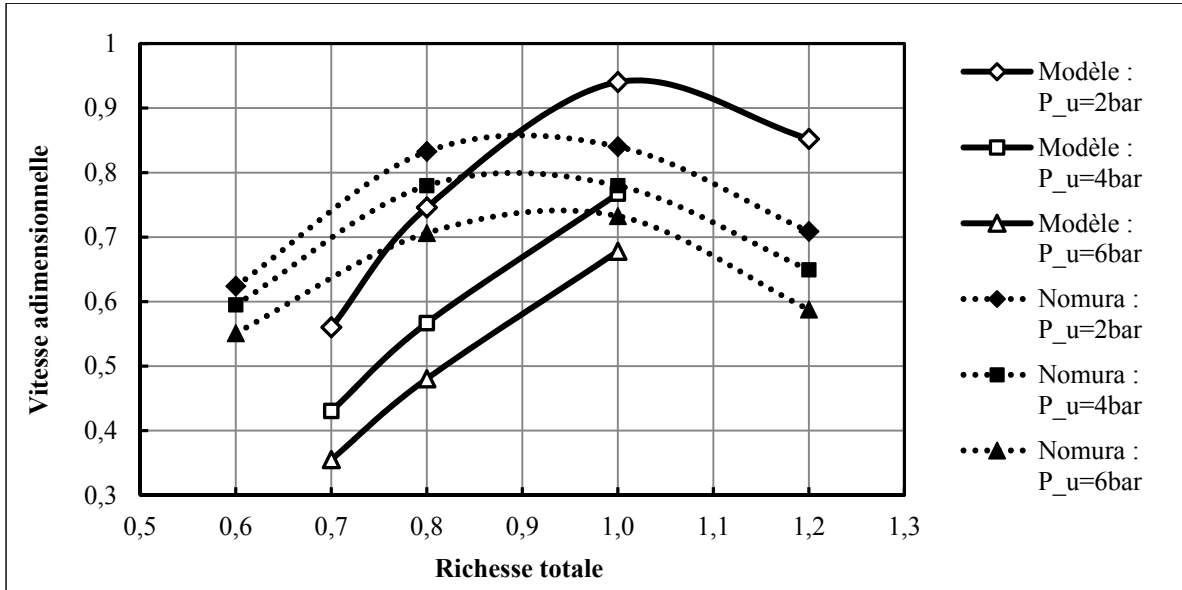


Figure 3.9 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2007) à ceux du modèle pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar.

Avec Nomura et al. (2007), l'augmentation de P_u induit une diminution de S_L qui est pourtant plus faible que celle constatée avec le modèle. On peut aussi noter que les tendances expérimentales sont décalées par rapport à celles du modèle. Ce décalage n'est apparu que dans les résultats de Nomura et al. (2000; 2007) et avait déjà été remarqué au début de la section 3.2.2 et dans le chapitre 1.

Du côté de l'évaporation des gouttes de faible diamètre ($d_i = 8 \mu\text{m}$), ϕ_{eff} reste assez proche de ϕ_o comme le montre la Figure 3.10.

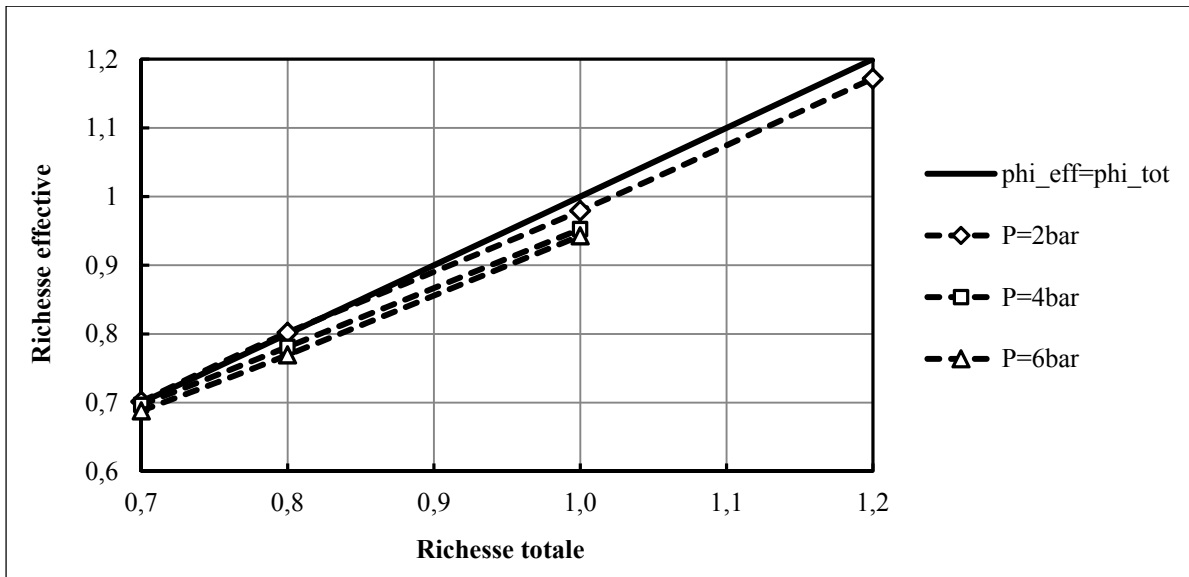


Figure 3.10 Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_o pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et P_u entre 2 et 6 bar, et pour des prémélanges gazeux

L'augmentation de P_u entraîne en effet une légère diminution de ϕ_{eff} . Les faibles variations de ϕ_{eff} suggèrent ainsi une évaporation complète des gouttes en amont de la flamme.

Bilan

Le Tableau 3.2 fait un résumé complet des tendances décrites précédemment pour S_L vs ϕ_o . Ce tableau précise aussi les points d'accord et de désaccord constatés lors de la comparaison des tendances du modèle à celles de la littérature.

Tableau 3.2 Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs ϕ_o

	Conditions	Tendances S_L vs ϕ_o du modèle	Comparaisons avec littérature
Tendance générale		$S_L \nearrow$ puis \searrow quand $\phi_o \nearrow$	EN ACCORD avec la littérature
		$\phi_o^{max} > 1$	EN ACCORD avec Hayashi et al. (1975; 1976) et EN DÉSACCORD avec Nomura et al. (2000; 2007)
Variations de ϕ_ℓ	$\phi_\ell \leq 0,21$; $d_i = 4 \mu\text{m}$; $P_u = 2 \text{ bar}$	$S_{L,max} \searrow$ et ϕ_o^{max} inchangé quand $\phi_\ell \nearrow$	Avec Hayashi et al. (1975) : $S_{L,max} \searrow$ et $\phi_o^{max} \nearrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$
		$\forall \phi_o :$ $S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	Avec Hayashi et al. (1975) : $S_{L,diph} < S_{L,gaz}$ seulement pour $\phi_o < 1,3$
		Influence marquée autour de la stœchiométrie	Influence moins marquée qu'avec Hayashi et al. (1975)
Variations de d_i	$d_i = 4$ à $40 \mu\text{m}$; $\phi_\ell = 0,07$; $P_u = 2 \text{ bar}$	$S_{L,max} \nearrow$ et $\phi_o^{max} \nearrow$ quand $d_i \nearrow$	Avec Hayashi et al. (1976) : $S_{L,max} \nearrow$ et ϕ_o^{max} inchangé quand $d_i \nearrow$
Variations de P_u	P_u entre 2 et 6 bar; $d_i = 8 \mu\text{m}$; $\phi_\ell = 0,2$	$S_L \searrow$ quand $P_u \nearrow$	Décalage avec les courbes de Nomura et al. (2007)
		$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$ $\forall P_u$ et ϕ_o	

En ce qui concerne la structure des flammes, les résultats du modèle ont montré que pour de petites gouttes ϕ_ℓ a peu d'influence sur δ_L . L'augmentation de d_i , par contre, amène à un épaissement de la flamme pour $\phi_o < 1,1$ et à son amincissement pour $\phi_o > 1,1$. Pour P_u , les tendances indiquent aussi que la flamme tend à s'amincir quand P_u augmente. Au niveau de l'évaporation des gouttes, nous avons noté que l'augmentation de d_i semble conduire à une évaporation incomplète des gouttes en amont de la flamme. Les grosses gouttes pénétreraient

donc dans la flamme, ce qui pourrait expliquer la variation de S_L et δ_L . Pour les petites gouttes, les changements de ϕ_ℓ et P_u ont cependant peu d'influence sur ϕ_{eff} .

3.2.3 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la richesse liquide

Cette section sera consacrée à l'étude du paramètre ϕ_ℓ . Les tendances obtenues pour des mélanges pauvres et riches seront analysées séparément.

Mélanges diphasiques globalement pauvres

La Figure 3.11 représente ainsi la variation de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent. Ici, la vitesse adimensionnelle a été obtenue en divisant chaque vitesse de flamme par $S_{L,gaz}$ (calculée à $\phi_o = 0,8$) s'élevant à 28,2 cm/s.

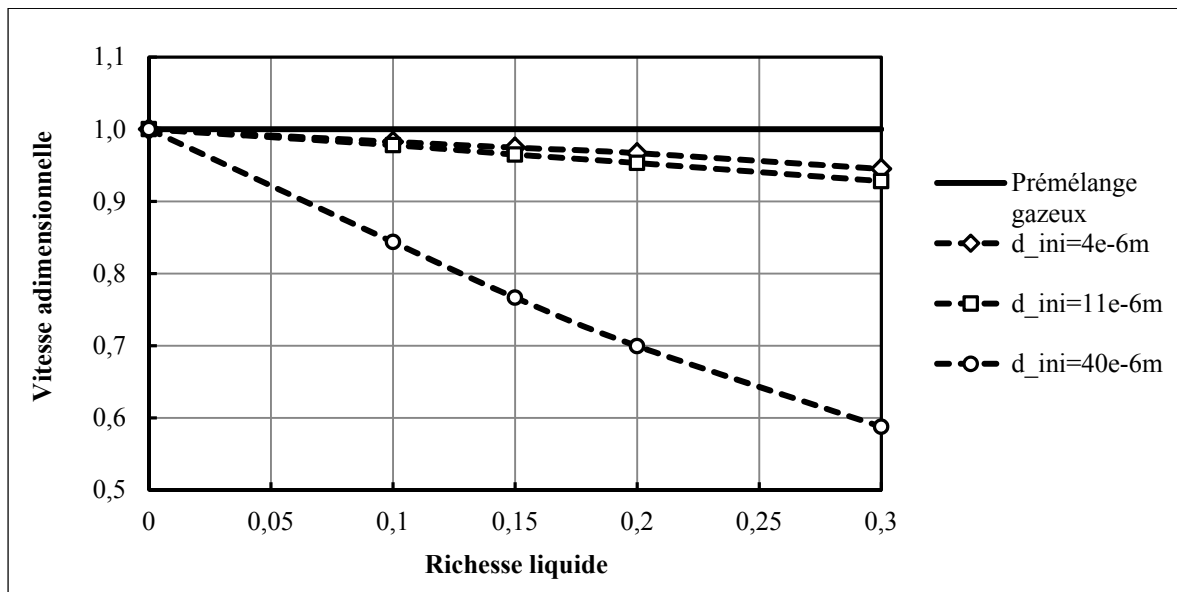


Figure 3.11 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 4 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent

Avec le modèle, l'augmentation de ϕ_ℓ dans des mélanges pauvres entraîne une diminution de S_L qui s'accroît avec d_i . On note en effet une diminution de S_L d'environ 38% à $\phi_\ell = 0,3$ quand d_i passe de 4 à 40 μm .

Afin de comparer ces tendances à celles de la littérature la Figure 3.12 a été tracée. Elle rassemble les résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) et ceux du modèle pour de l'éthanol avec $\phi_o = 0,8$ et d_i de 11 et 40 μm . La courbe de Ballal et Lefebvre (1981) pour de l'iso-octane avec $\phi_o = 0,65$ et $d_i = 28 \mu\text{m}$ a aussi été représentée. Elle apporte un point de comparaison supplémentaire même si ses conditions de mélange sont différentes.

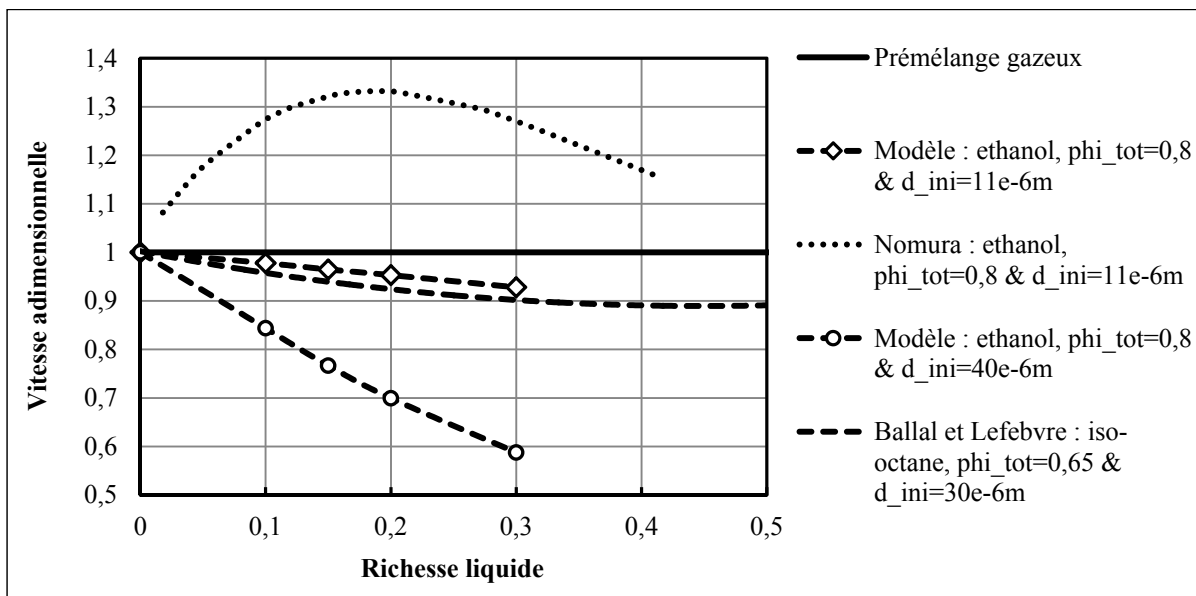


Figure 3.12 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Ballal et Lefebvre (1981) pour de l'iso-octane et avec $d_i = 28 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,65$, et par Nomura et al. (2000) à ceux du modèle pour de l'éthanol et avec $P_u = 2 \text{ bar}$, $\phi_o = 0,8$ et $d_i = 11$ et $40 \mu\text{m}$

Avec Ballal et Lefebvre (1981), S_L diminue quand ϕ_ℓ augmente et $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$ ce qui concorde avec les tendances du modèle. Pour $d_i = 40 \mu\text{m}$ (diamètre s'approchant de celui de Ballal et Lefebvre), la diminution est bien plus marquée avec le modèle. Ces écarts viennent en grande partie du fait que Ballal et Lefebvre utilisent de l'isooctane qui est plus volatile que l'éthanol. Les gouttes d'isooctane s'évaporent donc mieux que des gouttes

d'éthanol, ce qui diminue l'impact des gouttes sur la propagation de la flamme. La tendance de Nomura et al. (2000) est par contre très différente : S_L augmente puis diminue quand ϕ_ℓ augmente et $S_{L,diph}$ reste supérieure à $S_{L,gaz}$.

Au niveau de l'évaporation des gouttes, l'augmentation de la taille des gouttes semble aussi avoir un impact. La Figure 3.13 illustre l'évolution de ϕ_{eff} en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 11 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent.

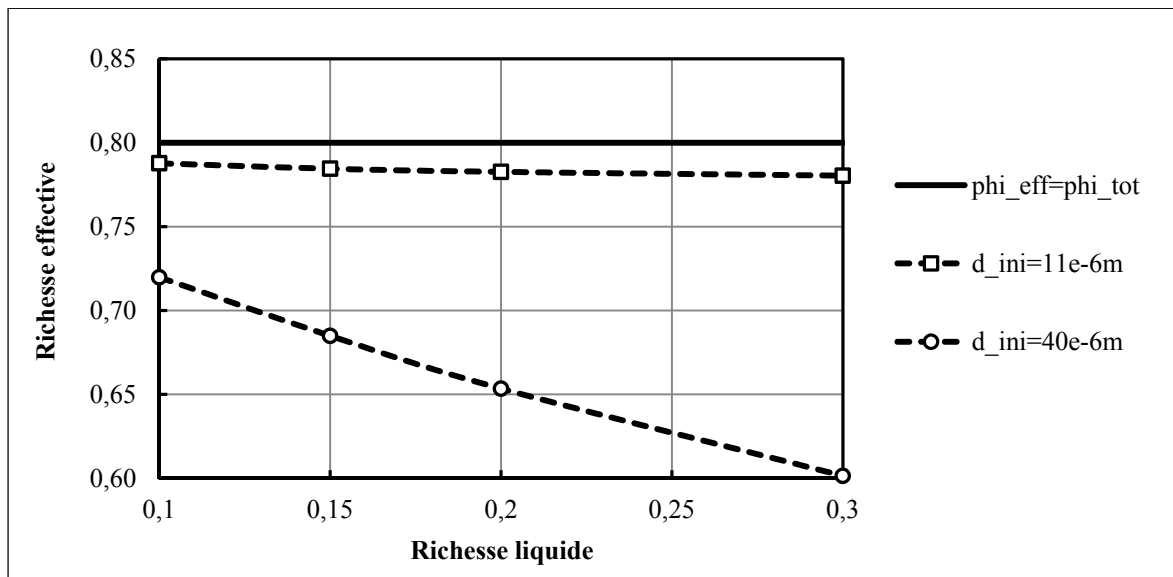


Figure 3.13 Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et d_i entre 11 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent

La superposition des courbes montre que plus d_i et ϕ_ℓ augmentent, plus ϕ_{eff} diminue et s'éloigne de ϕ_o . Ceci signifie que les grosses gouttes ont du mal à s'évaporer en amont de la flamme. Cette évolution vient du fait que des grosses gouttes requièrent une plus grande distance d'évaporation et que l'augmentation de ϕ_ℓ (quand ϕ_o est fixée) revient à augmenter le nombre de gouttes dans le domaine de calcul. Cet appauvrissement de la zone de réaction éloigne la flamme des conditions stœchiométriques ce qui explique la diminution de la vitesse.

Mélanges diphasiques globalement riches

Pour des mélanges riches, les tendances sont différentes. Les résultats ont été rassemblés sur la Figure 3.14. La vitesse adimensionnelle a été calculée de la même façon que pour la Figure 3.11 sauf que cette fois-ci, $S_{L,gaz}$ a été relevée à une richesse de 1,2 et s'élève à 33,6 cm/s. La tendance expérimentale de Nomura et al. (2000) a aussi été représentée sur la Figure 3.14 afin de permettre la comparaison du modèle à la littérature.

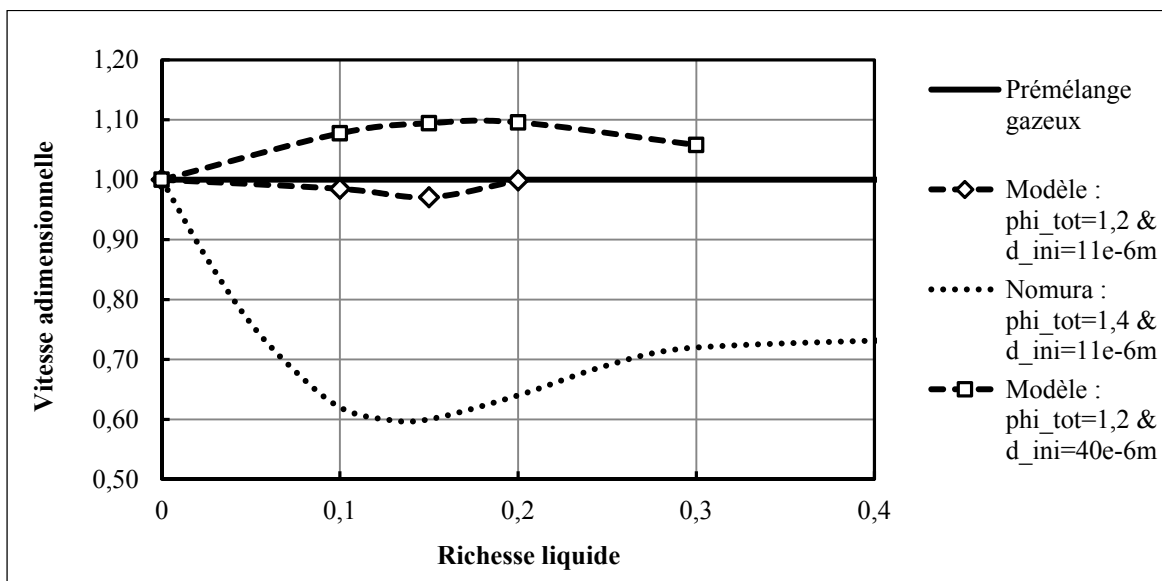


Figure 3.14 Comparaison des résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2000) avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,4$ et $d_i = 11 \mu\text{m}$, à ceux du modèle avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,2$ et d_i entre 11 et 40 μm

Pour des petites gouttes (11 μm), S_L diminue puis augmente quand ϕ_ℓ augmente et $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$. La tendance contraire est ensuite observée pour des grosses gouttes (40 μm). On peut cependant noter que pour $d_i = 11 \mu\text{m}$, la variation maximale par rapport à $S_{L,gaz}$ est d'environ 2,9% alors que pour $d_i = 40 \mu\text{m}$, elle s'élève à environ 9,6%. Les variations sont donc faibles pour les petites gouttes et bien plus marquées pour les grosses gouttes. Ces tendances ne se retrouvent pas tout à fait dans la littérature. L'allure générale de la courbe de Nomura et al. (2000) ressemble à celle du modèle, mais les ordres de grandeur ne correspondent pas du tout. La tendance expérimentale prévoit une diminution importante de S_L alors qu'avec le modèle S_L reste proche de $S_{L,gaz}$. Notons que cette différence

peut être partiellement attribuée à la différence de ϕ_o car, comme on l'a vu à la section 3.2.2, S_L diminue fortement quand $\phi_o \geq 1,2$ (forme de parabole inversée).

Pour les grosses gouttes, la tendance du modèle est similaire à celle de Lin et Sheu (1991). Il est cependant à noter que Lin et Sheu prévoient de très faibles variations de S_L ce qui est en désaccord avec le modèle. Cette différence pourrait venir du fait que Lin et Sheu étudient du n-octane alors que l'étude actuelle s'intéresse à de l'éthanol. Comme précisé précédemment, l'octane, étant plus volatile que l'éthanol, il s'évapore mieux.

La Figure 3.15 représente ensuite l'évolution de ϕ_{eff} en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 1,2$ et d_i entre 11 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent.

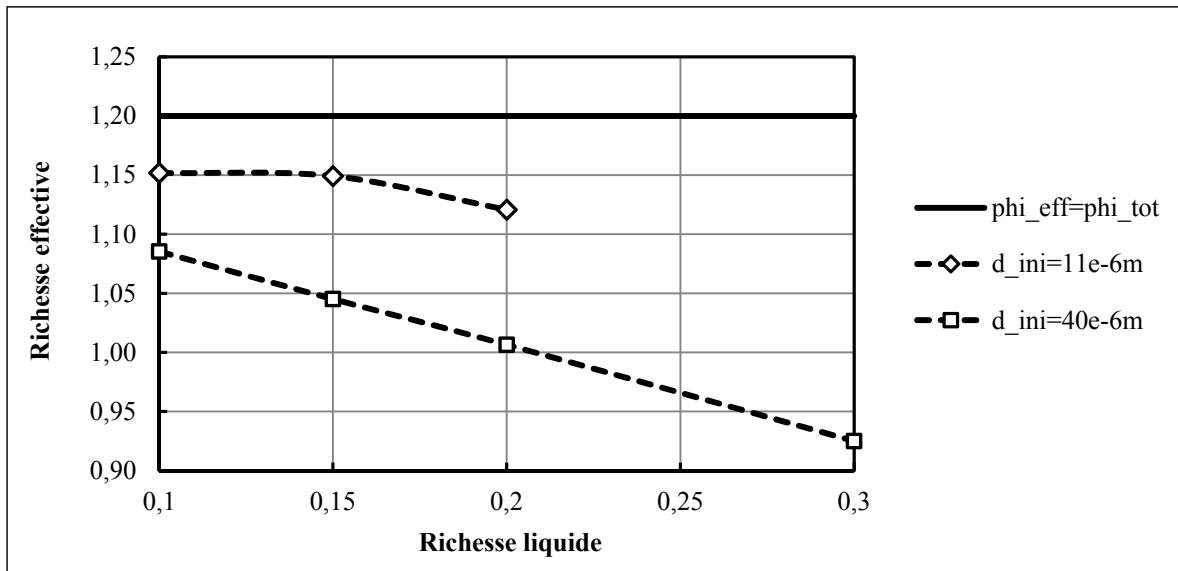


Figure 3.15 Évolution de la richesse effective en fonction de ϕ_ℓ pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,2$ et d_i entre 11 et 40 μm , et pour un prémélange gazeux équivalent

La tendance est la même que pour $\phi_o = 0,8$: ϕ_{eff} diminue quand ϕ_ℓ augmente. Cette diminution est très marquée pour les grosses gouttes alors qu'elle reste assez faible pour des petites gouttes. Il semblerait donc que les grosses gouttes ne parviennent pas à s'évaporer complètement en amont de la flamme. À $\phi_\ell = 0,2$ et $d_i = 40 \mu\text{m}$, on note que cet

appauvrissement de la zone de réaction rapproche la flamme à des conditions stœchiométriques ce qui explique pourquoi la vitesse est plus élevée. Il est ensuite intéressant de remarquer que la diminution de ϕ_{eff} est plus marquée pour les mélanges riches que pour les mélanges pauvres. Ceci semble vouloir dire que les gouttes s'évaporent moins bien dans des mélanges riches. Cette évolution est normale et s'explique à partir des équations de l'ANNEXE IV. L'augmentation de ϕ_o induit en effet une augmentation de la fraction massique de vapeur de carburant dans le gaz entourant la goutte ($Y_{F\infty}$). D'après les équations (A IV-9) et (A IV-11), cette augmentation de $Y_{F\infty}$ amène à une diminution du nombre de Spalding pour le transfert de masse (B_M) et donc à une diminution du taux d'évaporation instantané des gouttes.

Bilan

Le Tableau 3.3 réunit les tendances étudiées dans cette section pour S_L vs ϕ_ℓ . Globalement, nous avons pu noter que les résultats du modèle concordent avec ceux de la littérature.

Tableau 3.3 Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs ϕ_ℓ

	Conditions	Tendances S_L vs ϕ_ℓ du modèle	Comparaisons avec littérature
Variations de d_i Mélanges pauvres	$d_i \leq 40 \mu\text{m}$; $\phi_o = 0,8$; $P_u = 2 \text{ bar}$	$S_L \searrow$ quand $\phi_\ell \nearrow$	EN ACCORD avec Ballal et Lefebvre (1981) et EN DÉSACCORD avec Nomura et al. (2000)
		$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	
Variations de d_i Mélanges riches	$d_i = 11 \mu\text{m}$; $\phi_o = 1,2$; $P_u = 2 \text{ bar}$	$S_L \searrow$ puis \nearrow quand $\phi_\ell \nearrow$ (variations faibles)	Nomura et al. (2000) : Même allure générale mais avec des variations plus marquées
		$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	
Variations de d_i Mélanges riches	$d_i = 40 \mu\text{m}$; $\phi_o = 1,2$; $P_u = 2 \text{ bar}$	$S_L \nearrow$ puis \searrow quand $\phi_\ell \nearrow$ (variations marquées)	Lin et Sheu (1991) : Même allure générale mais avec des variations très faibles
		$S_{L,diph} > S_{L,gaz}$	

L'étude de la structure de la flamme a révélé que pour des mélanges pauvres δ_L tend à augmenter fortement lorsque d_i et ϕ_ℓ augmentent. Pour les mélanges riches et des grosses gouttes, δ_L diminue puis augmente quand ϕ_ℓ augmente. Ces variations de la structure de la flamme peuvent être directement corrélées à la diminution de ϕ_{eff} .

3.2.4 Évolution de la vitesse de flamme en fonction du diamètre initial des gouttes

Passons maintenant à l'analyse de l'influence du diamètre des gouttes. Comme on a pu le voir précédemment, l'influence de ce paramètre diffère selon la valeur de ϕ_o . La Figure 3.16 rassemble les tendances adimensionnelles obtenues pour des mélanges diphasiques avec $\phi_\ell = 0,07$ et ϕ_o entre 0,8 et 1,2, et pour les prémélanges gazeux équivalents.

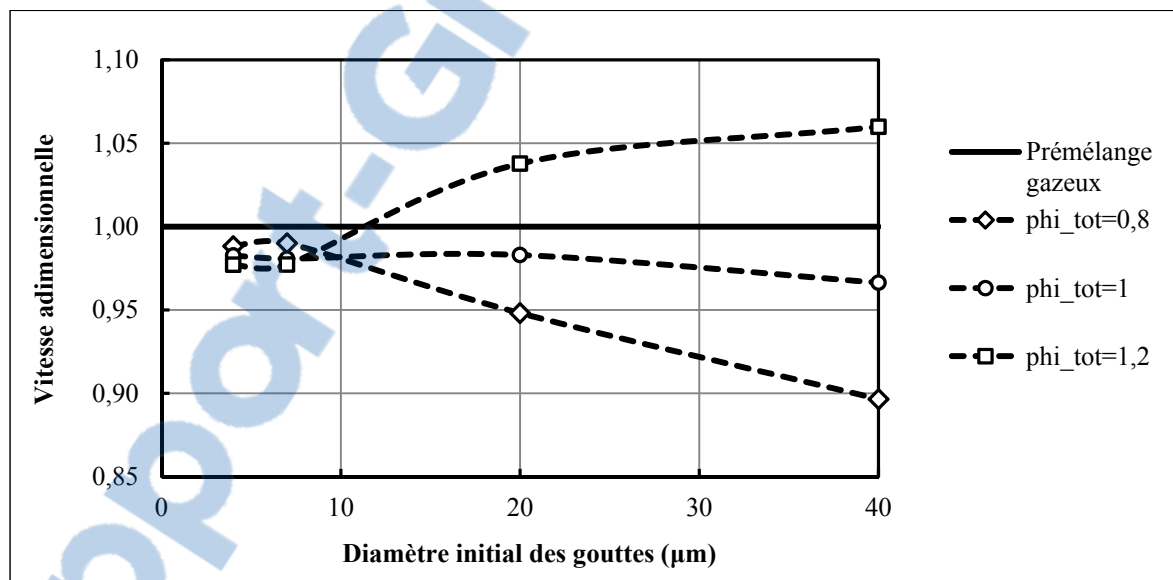


Figure 3.16 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,07$ et ϕ_o entre 0,8 et 1,2, et pour les prémélanges gazeux équivalents

On note que pour $\phi_o = 0,8$, S_L reste constante (pour $d_i < 10 \mu\text{m}$) puis diminue alors que pour $\phi_o = 1,2$ c'est le contraire. Pour $\phi_o = 1$, S_L varie peu et semble diminuer dès $d_i > 20 \mu\text{m}$. Autour de la stœchiométrie, les tendances semblent ainsi s'inverser, ce qui est conforme à ce qui avait été constaté dans la section 3.2.2. Pour la suite, nous étudierons séparément les

mélanges pauvres et riches. Nous nous attarderons notamment sur l'analyse de l'évaporation des gouttes.

Mélanges diphasiques globalement pauvres

Dans cette section, la variation de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i a été tracée pour différentes ϕ_ℓ . Les résultats adimensionnels obtenus pour $\phi_o = 0,8$ ont été rassemblés sur la Figure 3.17.

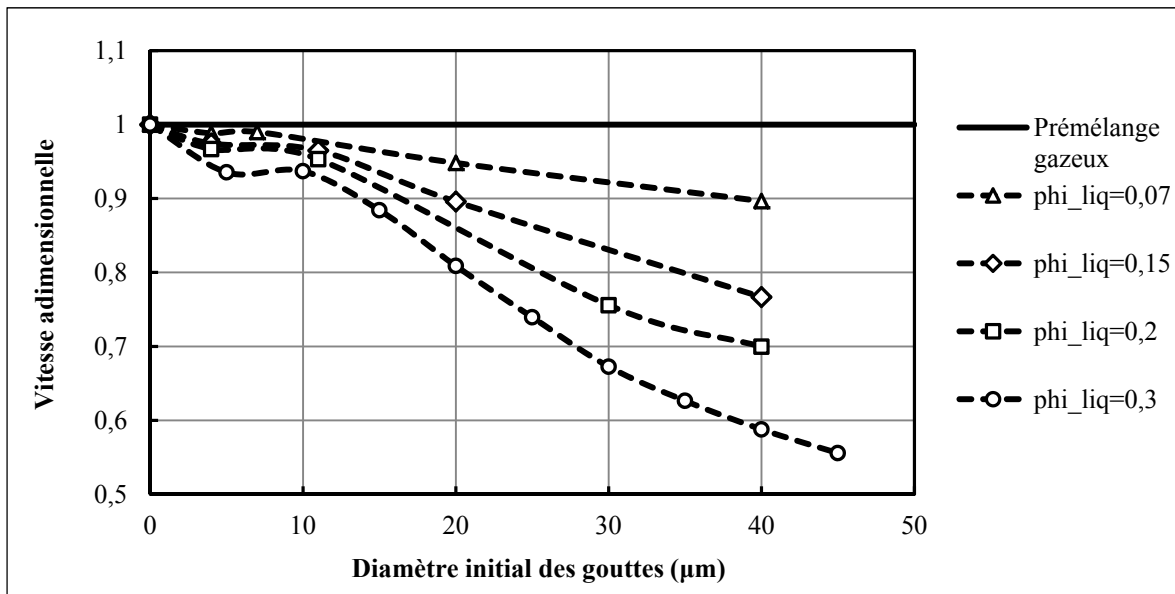


Figure 3.17 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,3 et $\phi_o = 0,8$, et pour un prémélange gazeux équivalent

Sur la Figure 3.17, on peut noter que plus ϕ_ℓ et d_i augmentent, plus l'influence des gouttes s'accroît. Entre 5 et 10 μm , S_L semble augmenter légèrement alors que pour $d_i > 10$ μm elle diminue fortement. Cette tendance est plus marquée pour ϕ_ℓ élevée.

Du côté de la littérature, les tendances sont assez différentes. La Figure 3.18 rassemble les résultats obtenus par :

- Nomura et al. (2000) avec $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell = 0,3$;
- Ballal et Lefebvre (1981) avec $\phi_o = 0,65$ et $\phi_\ell = 0,33$;

- Neophytou (2010) avec $\phi_\ell = \phi_o = 0,6$.

Ces tendances sont superposées à celle du modèle pour $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell = 0,3$.

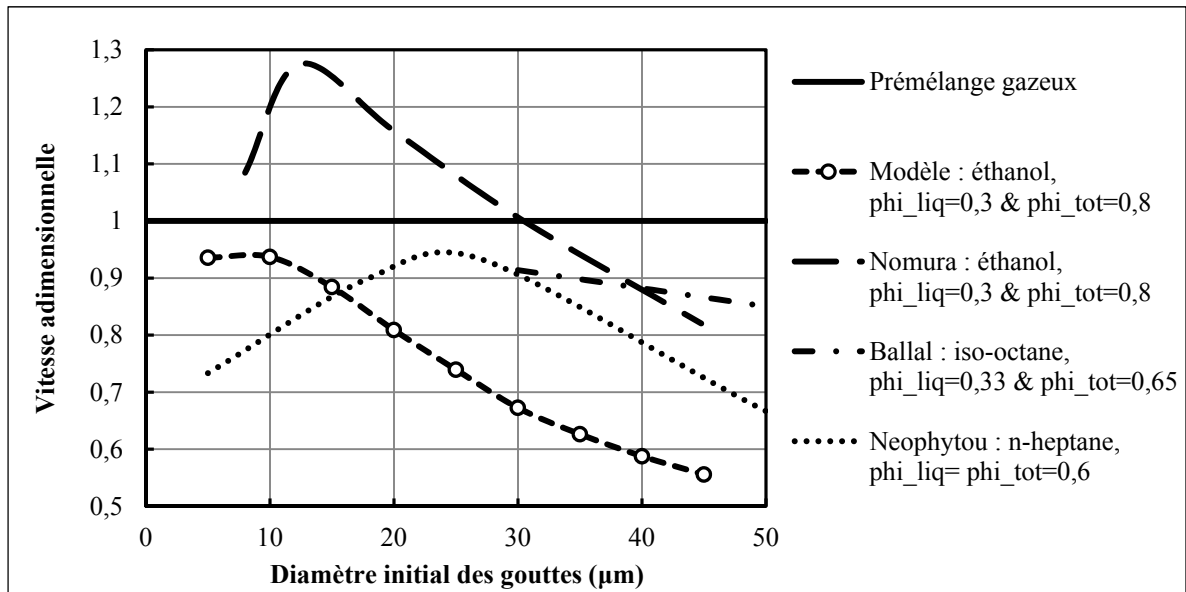


Figure 3.18 Comparaison des résultats du modèle avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell = 0,3$ aux résultats obtenus par Nomura et al. (2000) avec $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell = 0,3$, par Ballal et Lefebvre (1981) avec $\phi_o = 0,65$ et $\phi_\ell = 0,33$, et par Neophytou (2010) avec $\phi_\ell = \phi_o = 0,6$

La première différence notable est qu'avec Nomura et al. $S_{L,diph}$ est supérieure à $S_{L,gaz}$ pour d_i entre 8 et 30 μm alors que dans les autres études, $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$ quel que soit d_i . La tendance observée pour $d_i > 30$ μm est par contre la même dans toutes les études. On peut ensuite remarquer que l'augmentation de S_L est très faible avec le modèle alors que Neophytou (2010) et Nomura et al. (2000) en prévoient une très marquée. Le dernier point à noter est le décalage des courbes : avec Nomura et al. (2000), S_L diminue pour $d_i > 13$ μm alors qu'avec Neophytou (2010) cette diminution est prévue pour $d_i > 25$ μm . Ces écarts semblent dus aux différences dans les conditions de mélange et à la distance d'injection des gouttes. Dans le modèle du présent mémoire, en effet, les gouttes sont injectées très près de la flamme, ce qui n'est pas forcément le cas dans les expériences.

Rappelons que la comparaison à l'étude de Neophytou (2010) est très intéressante puisque dans son étude, Neophytou utilise aussi COSILAB pour simuler la propagation de flamme en milieu diphasique.

Comme nous avons pu le remarquer dans les sections précédentes, la propagation de la flamme est très sensible à la taille des gouttes et cette sensibilité est directement due à l'évaporation tardive des gouttes. La Figure 3.19 rassemble les tendances obtenues pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,3 et $\phi_o = 0,8$, et pour un prémélange gazeux équivalent.

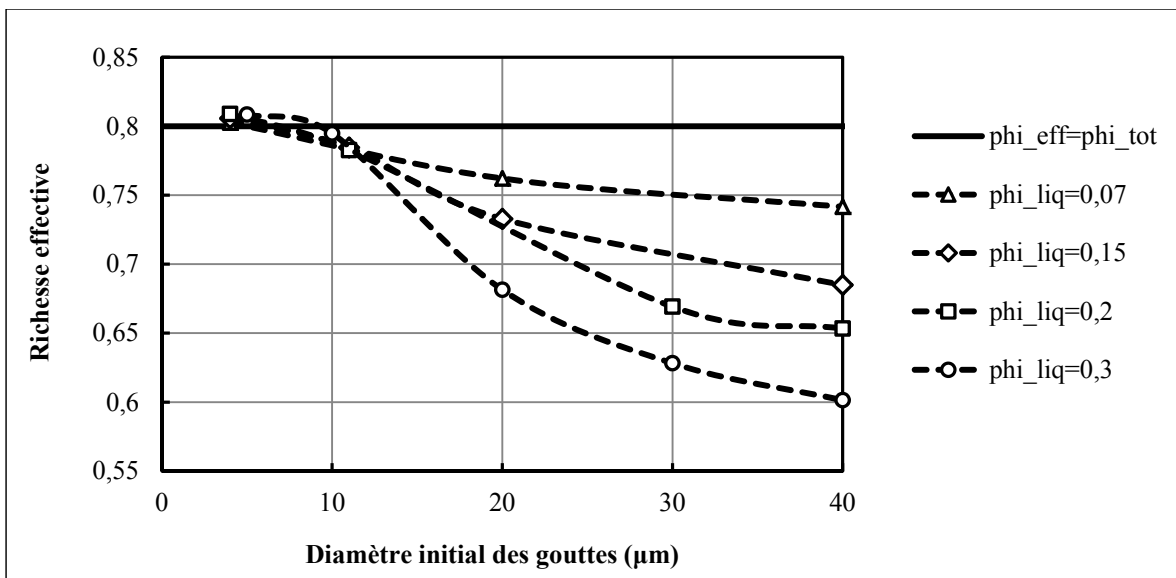


Figure 3.19 Évolution de la richesse effective en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,3 et $\phi_o = 0,8$, et pour un prémélange gazeux équivalent

Les courbes montrent que pour $d_i < 11 \mu\text{m}$ ϕ_{eff} reste proche de ϕ_o ce qui confirme que les petites gouttes s'évaporent complètement en amont de la flamme. Pour de plus grosses gouttes, on note par contre une diminution de ϕ_{eff} quand d_i augmente. Cette diminution est plus marquée quand ϕ_ℓ est élevée (car plus de gouttes dans le domaine) : pour $d_i = 40 \mu\text{m}$, ϕ_{eff} varie de 18,9% quand ϕ_ℓ passe de 0,07 à 0,3. Dans le cas des grosses gouttes, l'évaporation n'a donc pu se faire complètement en amont de la flamme. Le mélange gazeux résultant est

ainsi plus pauvre et réagira moins intensivement. Dans ce cas, S_L est donc plus faible et δ_L plus élevée.

Mélanges diphasiques globalement riches

Pour les mélanges riches, les résultats obtenus avec le modèle ont été rassemblés sur la Figure 3.20 pour ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,2.

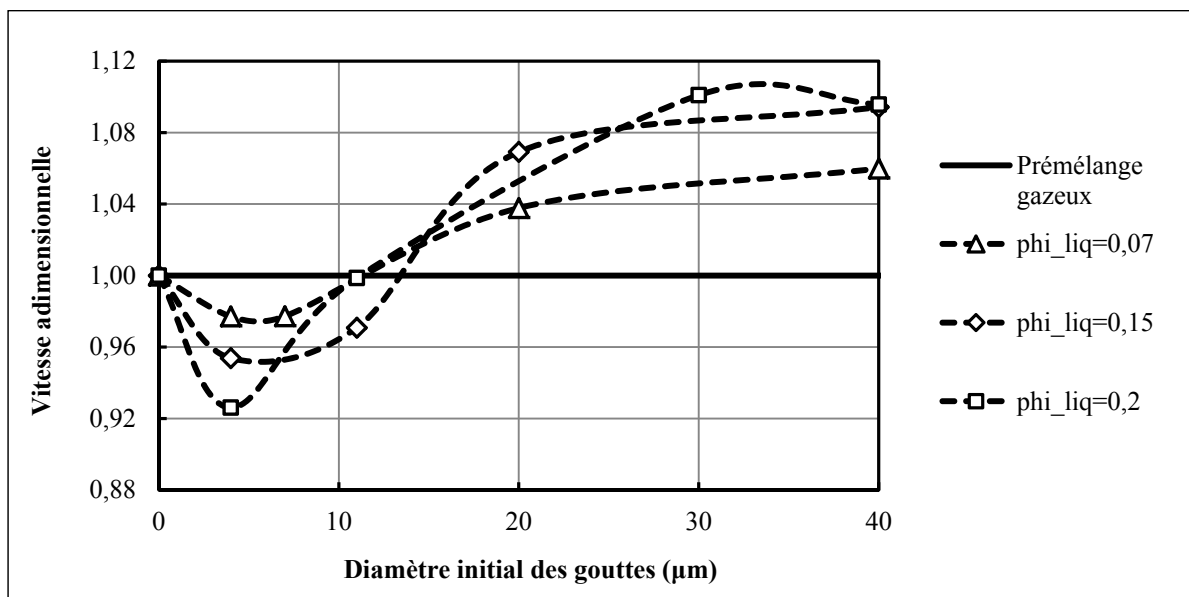


Figure 3.20 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de d_i pour des mélanges diphasiques avec $P_u = 2$ bar, ϕ_ℓ entre 0,07 et 0,2 et $\phi_o = 1,2$, et pour un prémélange gazeux équivalent

L'augmentation de d_i provoque une diminution puis une augmentation de S_L . À $20 \mu\text{m}$, $S_{L,diph}$ est d'ailleurs supérieure à $S_{L,gaz}$. Les tendances de Lin et Sheu (1991) sont totalement opposées à la tendance du modèle. La Figure 3.21 illustre cette opposition des tendances.

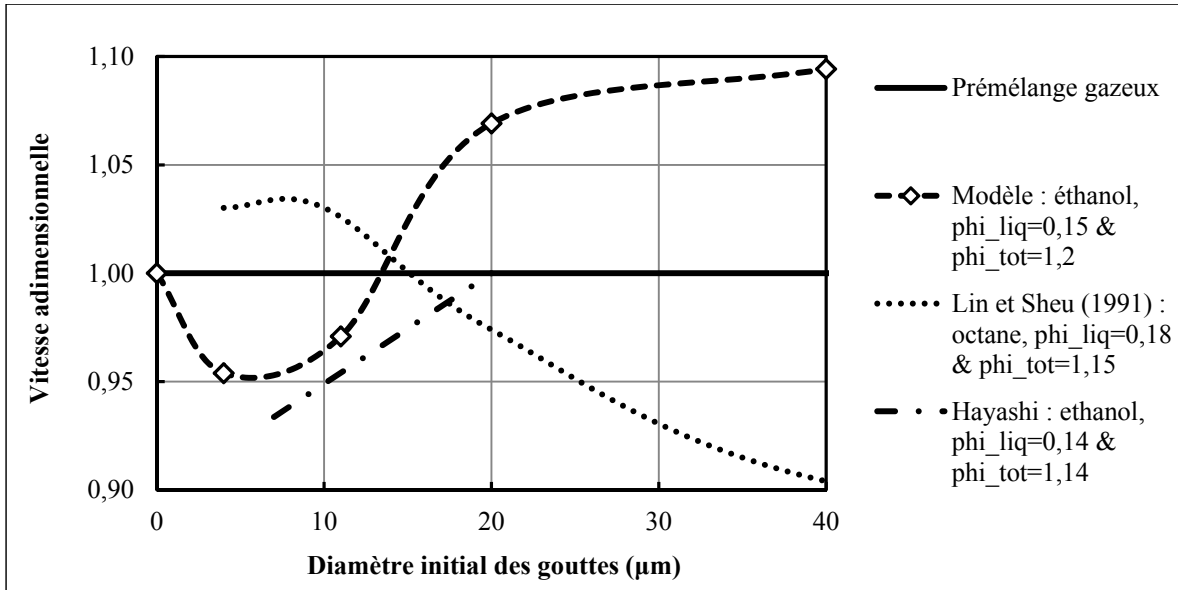


Figure 3.21 Comparaison des résultats du modèle avec $P_u = 2$ bar, $\phi_o = 1,2$ et $\phi_\ell = 0,15$ aux résultats obtenus par Lin et Sheu (1991) avec $\phi_o = 1,15$ et $\phi_\ell = 0,18$, et par Hayashi et al. (1976) avec $\phi_o = 1,14$ et $\phi_\ell = 0,14$

Les différences dans les conditions de mélange ne semblent pas expliquer l'opposition des deux tendances. Sur ce point, il semblerait que le modèle de Lin et Sheu soit en désaccord avec le modèle de notre étude. Cette différence de tendances vient probablement du fait que Lin et Sheu adoptent une approche mathématique assez simplificatrice. Les résultats expérimentaux d'Hayashi, Kumagai et Sakai (1976), quant à eux, amènent à une tendance similaire à celle du modèle du mémoire (pour d_i entre 7 et 20 μm). Cette dernière remarque prouve de nouveau la disparité des résultats de la littérature.

Du côté de l'évaporation des gouttes, on constate la même tendance que précédemment : quand d_i augmente, ϕ_{eff} diminue. Pour de faibles d_i , ϕ_{eff} reste proche de ϕ_o mais dès 11 μm la diminution de ϕ_{eff} devient significative. Comme nous l'avons déjà évoqué, la diminution de ϕ_{eff} rapproche le mélange gazeux résultant de la stœchiométrie, ce qui provoque des réactions plus intenses, des vitesses de flamme plus élevées et des épaisseurs de flamme plus faibles. Neophytou (2010) est d'ailleurs arrivé aux mêmes constats.

Bilan

Le Tableau 3.4 réunit les commentaires faits dans cette section pour S_L vs d_i . Les différences et similarités constatées entre les tendances du modèle et celles de la littérature y sont mises en avant.

Tableau 3.4 Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs d_i

	Conditions	Tendances S_L vs d_i du modèle	Comparaisons avec littérature
Variations de ϕ_ℓ - Mélanges pauvres	$\phi_o = 0,8; \phi_\ell \leq 0,3;$ $P_u = 2$ bar	Entre 5 et 10 μm : $S_L \nearrow$ légèrement quand $d_i \nearrow$	<p>Allure générale EN ACCORD avec littérature mais :</p> <ul style="list-style-type: none"> - Nomura et al (2000) : $S_{L,diph} > S_{L,gaz}$ pour $d_i < 30 \mu\text{m}$ et $S_L \nearrow$ fortement jusqu'à 13 μm - Neophytou (2010) : tendance décalée et augmentation jusqu'à 20 μm très marquée
		Pour $d_i > 10 \mu\text{m}$: $S_L \searrow$ quand $d_i \nearrow$	
		$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	
Variations de ϕ_ℓ Mélanges riches	$\phi_o = 1,2 \phi_\ell \leq 0,2;$ $P_u = 2$ bar	Pour $d_i > 4 \mu\text{m}$: $S_L \nearrow$ quand $d_i \nearrow$	<p>EN ACCORD avec Hayashi et al. (1976) mais : tendance inverse pour Lin et Sheu (1991)</p>
		Pour $d_i \geq 20 \mu\text{m}$: $S_{L,diph} > S_{L,gaz}$	Avec Hayashi et al. (1976) : $S_{L,diph} \approx S_{L,gaz}$ pour $d_i = 20 \mu\text{m}$

Comme dans la section précédente, le modèle révèle que pour les mélanges pauvres, l'augmentation de d_i et ϕ_ℓ entraîne une augmentation de δ_L . Pour des mélanges riches, la flamme tend plutôt à s'amincir. Au niveau de l'évaporation, le même constat est fait pour les deux types de mélanges : ϕ_{eff} s'éloigne significativement de ϕ_o quand d_i et ϕ_ℓ augmentent.

3.2.5 Évolution de la vitesse de flamme en fonction de la pression des gaz frais

Pour reprendre le travail expérimental de Nomura et al. (2007) sur l'influence de la pression initiale, nous avons étudié plusieurs conditions de pression pour un mélange diphasique avec $d_i = 8 \mu\text{m}$ et $\phi_\ell = 0,2$. Rappelons que des problèmes de convergence des calculs nous ont contraints à limiter notre étude à des mélanges globalement pauvres et stoechiométriques. Dans cette partie, les résultats obtenus numériquement ont été adimensionnés en divisant chaque vitesse de flamme par la vitesse de flamme obtenue pour un mélange gazeux à une pression de 2 bar et à la stœchiométrie. Les tendances obtenues ont été rassemblées sur la Figure 3.22.

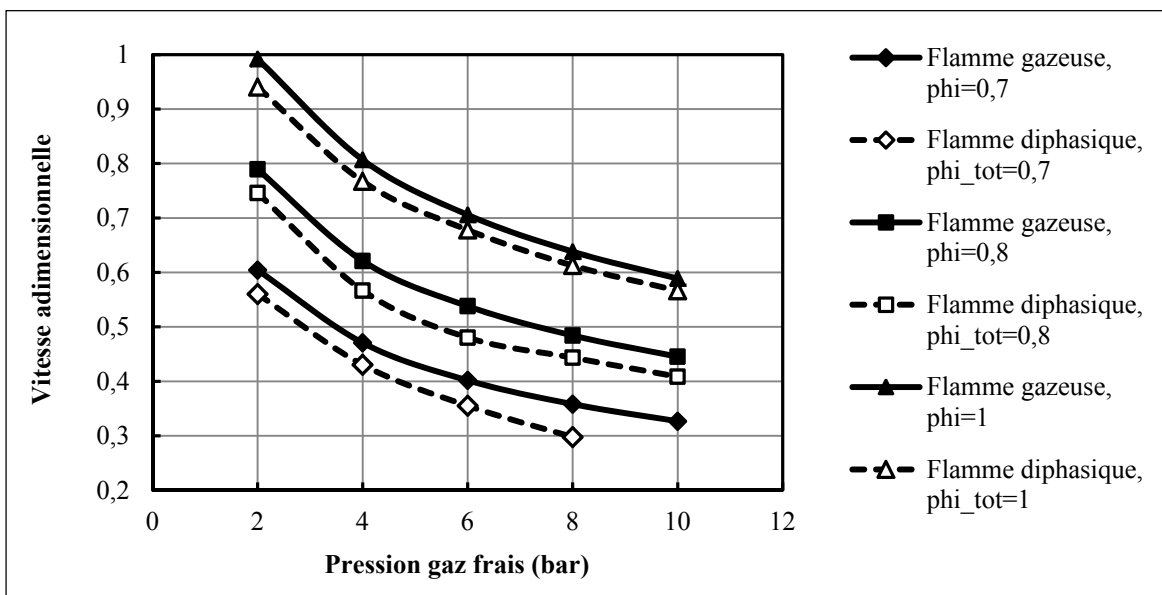


Figure 3.22 Évolution de la vitesse adimensionnelle en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0, et pour des prémélanges gazeux équivalents

Ces tendances révèlent tout d'abord que S_L diminue lorsque P_u augmente ce qui est en accord avec la littérature (Nomura et al., 2007). Avec le modèle actuel, la présence de gouttes fait diminuer S_L : quelles que soient la pression et la richesse totale testées, $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$. Avec Nomura et al. (2007), par contre, $S_{L,diph}$ reste inférieure à $S_{L,gaz}$ uniquement pour

$\phi_o \geq 1$ (cf. section 1.3.5). La Figure 3.23 rassemble les tendances obtenues par Nomura et al. (2007) et celles du modèle pour des mélanges diphasiques avec $\phi_o = 0,8$ et 1.

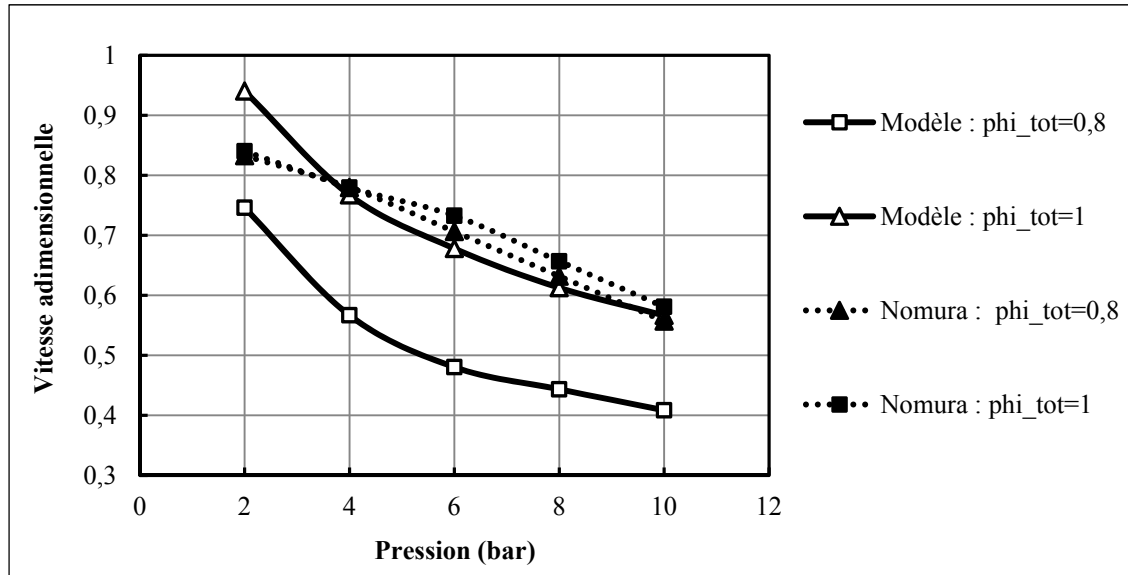


Figure 3.23 Comparaison des résultats du modèle aux résultats expérimentaux obtenus par Nomura et al. (2007) avec $P_u = 2$ bar, $\phi_\ell = 0,2$ et $\phi_o = 0,8$ et 1

Avec les résultats expérimentaux, il semblerait que S_L diminue quand P_u augmente ce qui concorde avec le modèle. Par contre, S_L varie très peu quand ϕ_o passe de 0,8 à 1 et ce pour toutes les pressions testées. Dans la littérature, il n'a été trouvé aucune autre étude s'intéressant à l'influence de P_u , il n'a donc pas été possible de comparer la tendance du modèle à une autre tendance.

- Structure de la flamme

La Figure 3.24 présente ensuite l'évolution de δ_L en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0, et pour des mélanges gazeux équivalents.

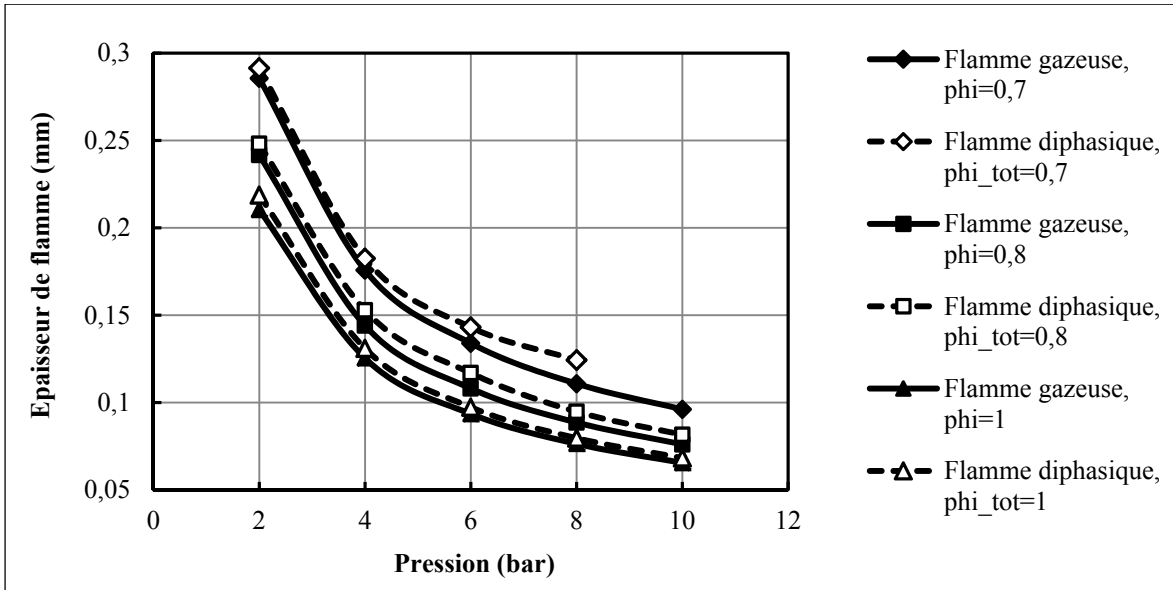


Figure 3.24 Évolution de l'épaisseur de flamme en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0, et pour des prémélanges gazeux équivalents

Comme expliqué dans la section 3.2.1, il a été démontré théoriquement et expérimentalement que δ_L tend à diminuer quand P_u augmente (Turns, 2000). Les tendances obtenues numériquement vérifient cette propriété des flammes comme le montre la Figure 3.24. Quelle que soit la pression, la présence de petites gouttes (ici $8 \mu\text{m}$) induit aussi un épaissement de la flamme pour des mélanges globalement pauvres et stœchiométriques. Cet épaissement par rapport à $\delta_{L,gaz}$ varie entre 2 et 12%.

- Évaporation des gouttes

Les résultats expérimentaux de Nomura et al. (2007) suggèrent que l'augmentation de P_u améliore l'évaporation des gouttes en amont de la flamme. Voyons s'il en est de même numériquement. Nos analyses se baseront sur la Figure 3.25 qui représente l'évolution de ϕ_{eff} en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0.

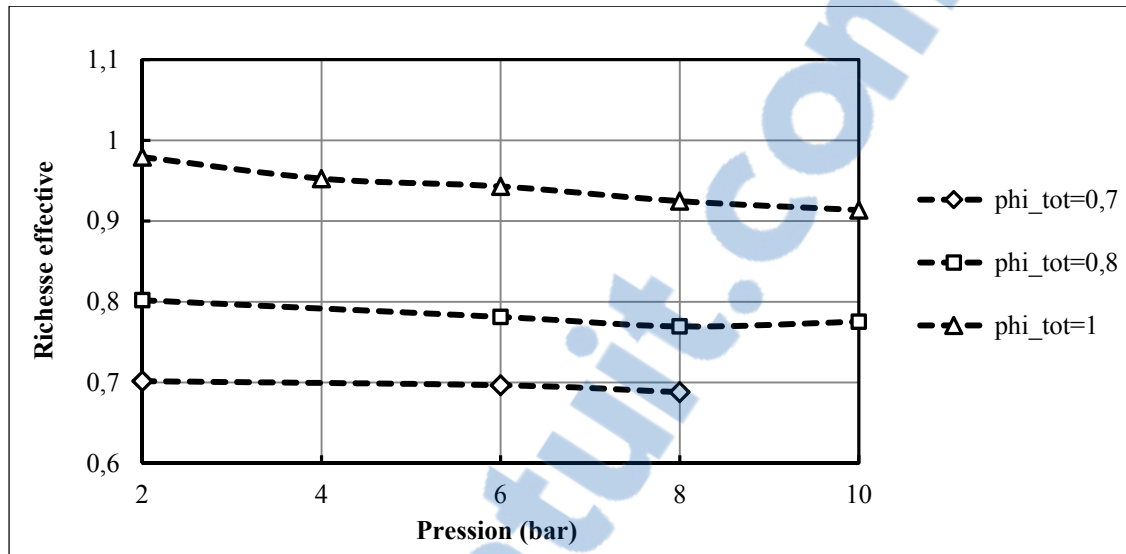


Figure 3.25 Évolution de la richesse effective en fonction de P_u pour des mélanges diphasiques avec $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1,0

Pour $\phi_o \leq 0,8$, ϕ_{eff} reste très proche de ϕ_o ce qui signifie que les gouttes s'évaporent complètement en amont de la flamme. À la stœchiométrie, par contre, on peut noter une certaine diminution de ϕ_{eff} quand P_u augmente. Cette diminution n'est pas assez marquée pour signifier une évaporation tardive. En effet, nous verrons avec l'étude des profils que l'évaporation reste complète en amont de la flamme et ce quelle que soit la pression testée. Ce dernier constat est en accord avec les conclusions de Nomura et al. (2007).

Bilan

Le Tableau 3.5 résume les tendances décrites précédemment pour S_L vs P_u .

Tableau 3.5 Récapitulatif des tendances du modèle - S_L vs P_u

Conditions	Tendances S_L vs P_u du modèle	Comparaisons avec littérature
	$S_L \searrow$ quand $P_u \nearrow$	EN ACCORD avec la littérature
$\phi_o \leq 1$; $\phi_\ell = 0,2$; $d_i = 8 \mu\text{m}$	$S_{L,diph} < S_{L,gaz}$	EN DÉSAccORD avec Nomura et al. (2007) sauf pour $\phi_o = 1$

Les tendances obtenues numériquement sont globalement similaires à celles de la littérature. Au niveau de la structure de la flamme et de l'évaporation des gouttes, les résultats numériques ont aussi montré que l'augmentation de la pression entraîne une diminution de δ_L mais change très peu ϕ_{eff} (comme vu à la section 3.2.2).

3.2.6 Analyse complémentaire des profils

Pour se faire une meilleure idée de l'état de l'évaporation, Neophytou (2010) explique qu'il est conseillé d'observer le profil de la température, celui de la chaleur dégagée, et ceux des fractions molaires en carburant, dioxygène (O_2) et dioxyde de carbone (CO_2). En effet, ϕ_{eff} ne donne qu'une valeur approximative de la richesse gazeuse dans la zone de réaction. L'analyse des profils nous permettra de repérer les conditions dans lesquelles l'évaporation des gouttes se fait tardivement.

Mélanges diphasiques globalement pauvres

Les profils de la Figure 3.26 illustrent la variation de la concentration de carburant dans la zone près de la flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$.

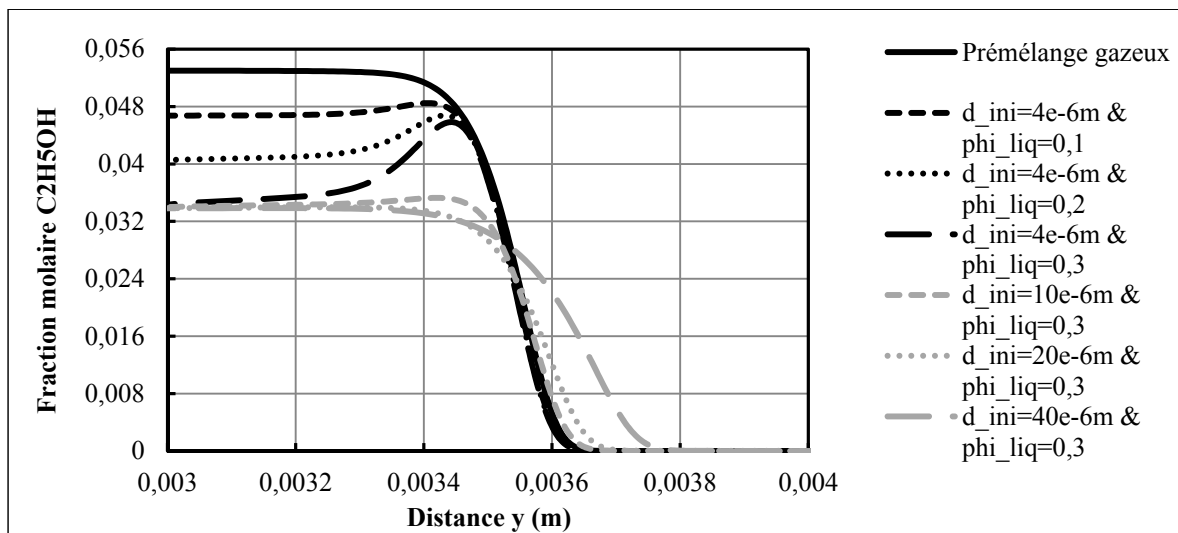


Figure 3.26 Évolution de la fraction molaire d'éthanol dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent

Dans le cas d'un mélange diphasique globalement pauvre et contenant des petites gouttes ($d_i \leq 10 \mu\text{m}$), les profils obtenus sont très proches de celui obtenu pour un mélange gazeux équivalent. Dans ces conditions, l'évaporation se fait donc complètement et en amont du front de flamme d'après Neophytou (2010). Ce constat valide les conclusions tirées à partir de ϕ_{eff} . Pour de plus grosses gouttes (20 et 40 μm), les profils obtenus se superposent tardivement à celui du mélange gazeux équivalent. L'évaporation des grosses gouttes n'est donc pas complète en amont de la flamme, elle se poursuit dans la flamme et sur une longueur plus ou moins importante derrière le front de flamme. Neophytou (2010) explique d'ailleurs que la pénétration des gouttes dans la flamme entraîne un changement de la structure de la flamme. Ce point se retrouve avec le modèle puisqu'à la section 3.2.4, nous avons vu que l'augmentation de d_i induit une augmentation de δ_L .

On peut ensuite noter que les courbes présentent un pic juste avant la flamme pour $d_i = 4 \mu\text{m}$. Celui-ci est probablement dû à l'élévation de température dans cette zone qui favorise le phénomène d'évaporation. Pour $\phi_\ell = 0,3$ et $d_i = 4 \mu\text{m}$, par exemple, on relève une température d'environ 520 K à l'endroit où le pic d'évaporation est observé. Notons aussi que ce pic est de plus en plus prononcé lorsque l'on augmente ϕ_ℓ . Ceci semble cohérent puisque l'augmentation de ϕ_ℓ revient à augmenter le nombre de gouttes dans le mélange. La quantité d'éthanol évaporé augmente donc (dans des conditions où l'évaporation est favorisée). Ces pics restent, cependant, inférieurs au plateau obtenu pour un mélange gazeux équivalent. Ceci vient probablement du fait que l'oxydation de l'éthanol a déjà commencé. Quand d_i augmente, le pic d'évaporation est de moins en moins marqué. Pour $d_i > 10 \mu\text{m}$, il n'apparaît carrément plus. Les grosses gouttes semblent donc fournir peu de vapeur de carburant. Dans sa thèse, Neophytou (2010) est d'ailleurs arrivé au même constat.

Pour s'assurer que l'évaporation des gouttes est tardive, il est aussi intéressant d'observer les profils de la fraction molaire de O_2 et de CO_2 . Ici, nous présenterons seulement les profils obtenus pour de l' O_2 afin de ne pas alourdir cette section. La Figure 3.27 rassemble ainsi les profils obtenus pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent.

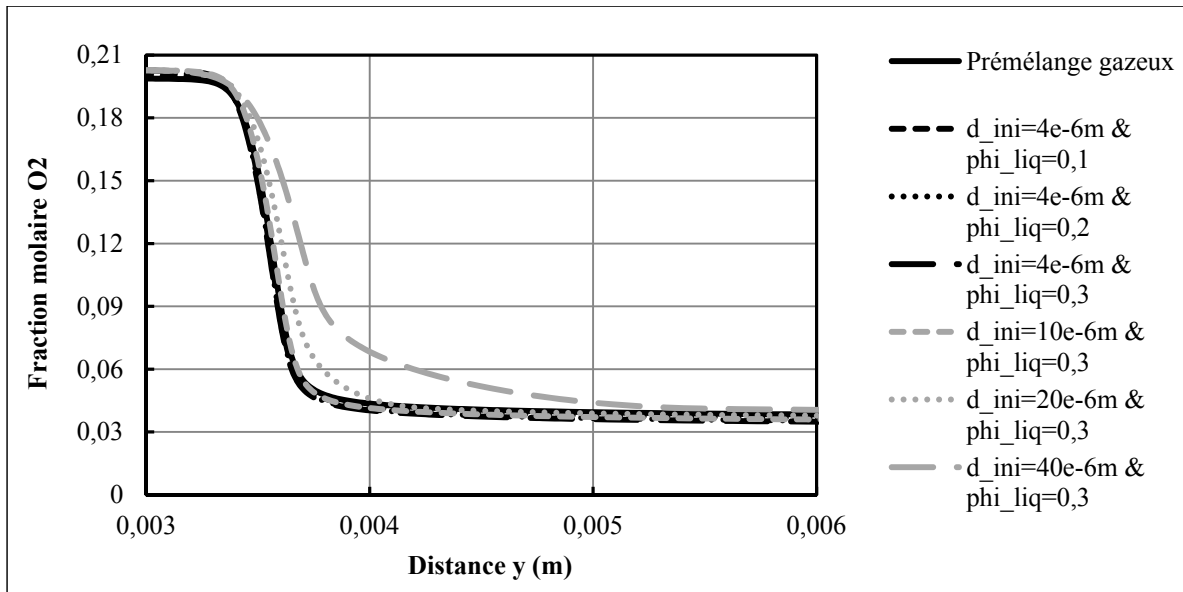


Figure 3.27 Évolution de la fraction molaire de dioxygène dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent

Sur la Figure 3.27, on peut noter que la diminution de O_2 est plus faible pour des gouttes de 20 et 40 μm de diamètre. Les profils ne se superposent pas à la courbe obtenue pour un mélange gazeux équivalent, au contraire de ceux obtenus pour de plus petites gouttes. L'oxydation se poursuit sur une longueur plus ou moins importante derrière la flamme, ce qui confirme bien que l'évaporation n'est pas complète en amont de la flamme (Neophytou, 2010). L'évaporation peut être considérée comme terminée lorsque les profils du mélange diphasique se superposent à celui du mélange gazeux. Notons que les profils suivis par la fraction molaire en CO_2 amènent aux mêmes constats, l'augmentation de la fraction molaire étant cette fois moins marquée.

L'évaporation tardive des gouttes se retrouvent aussi sur les profils de température. La Figure 3.28 rassemble ainsi les profils obtenus pour les mêmes conditions de mélange.

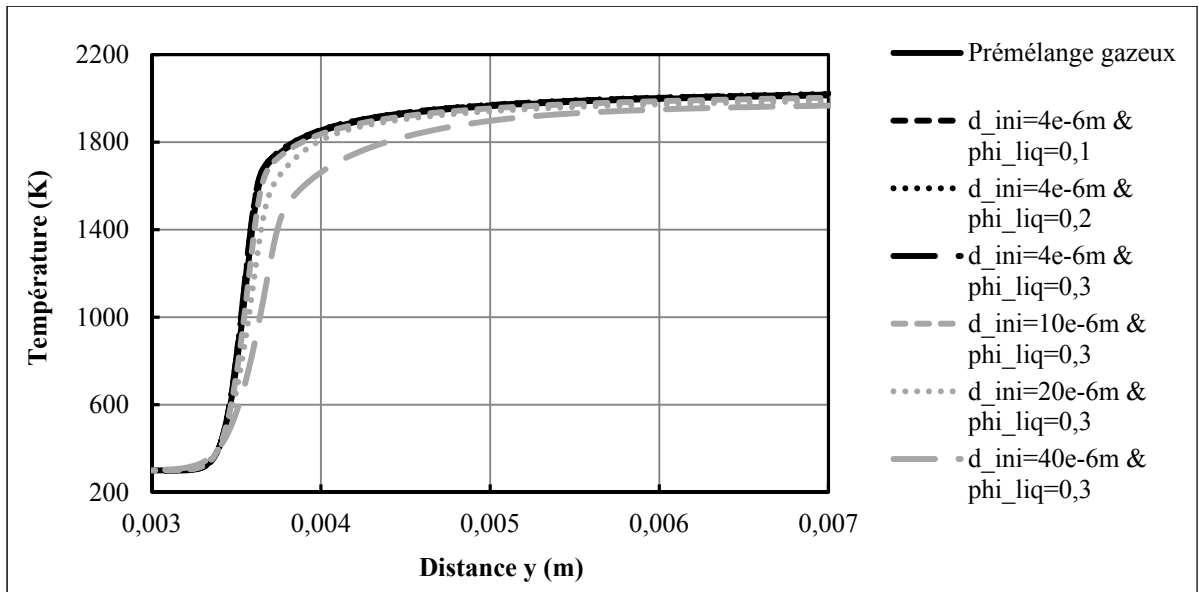


Figure 3.28 Évolution de la température dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent

Sur la Figure 3.28, la superposition des courbes met en avant une certaine diminution de la température de la flamme pour les grosses gouttes. Cette diminution est probablement due au fait que l'évaporation est un phénomène endothermique (Hayashi, Kumagai et Sakai, 1976). Elle peut aussi être expliquée par la diminution de l'intensité des réactions. Comme nous l'avons vu, la « mauvaise » évaporation des gouttes amène à des mélanges gazeux dont la richesse est inférieure à ϕ_o (en amont de la flamme) et qui réagissent donc moins intensivement.

L'évaporation tardive des grosses gouttes a ainsi un impact sur le débit volumique de chaleur dégagée. La Figure 3.29 rassemble les profils obtenus pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_\ell \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent.

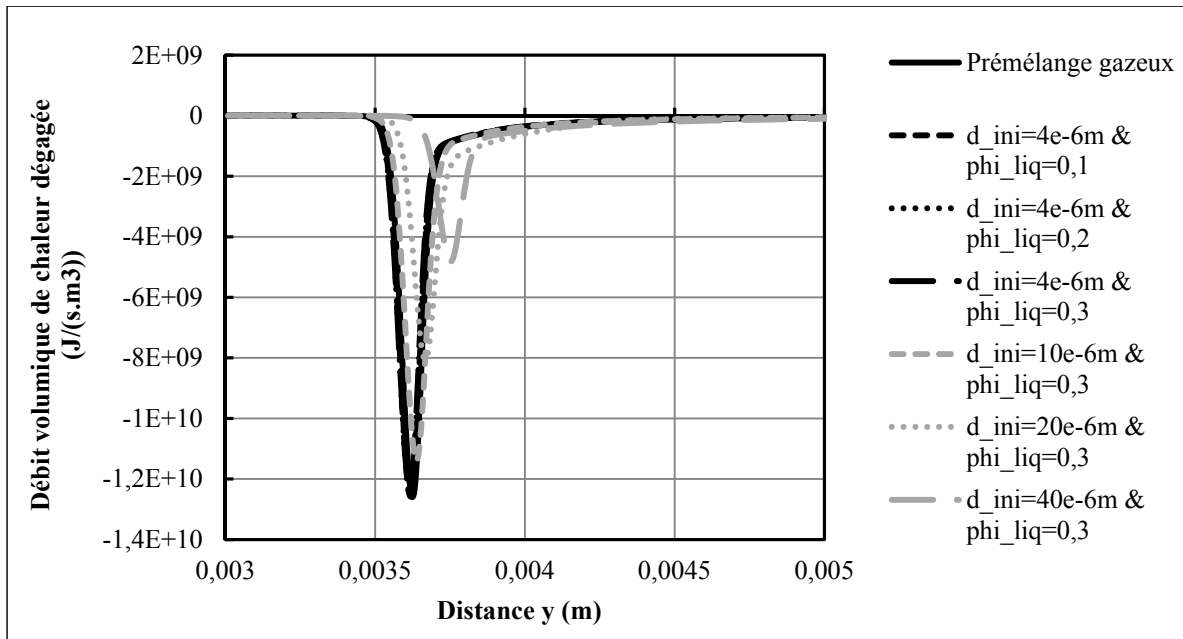


Figure 3.29 Évolution du débit volumique de chaleur dégagée dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec $d_i \leq 40 \mu\text{m}$, $\phi_o = 0,8$ et $\phi_l \leq 0,3$, et pour le prémélange gazeux équivalent

On peut noter que le pic de chaleur dégagée tend à diminuer et à se décaler quand d_i augmente, comme a pu le constater Neophytou (2010). Cette diminution confirme bien que l'évaporation tardive des gouttes mène à des réactions moins intenses.

Mélanges diphasiques globalement riches

Pour $d_i \leq 11 \mu\text{m}$, les courbes obtenues en milieu diphasique riche se superposent assez tôt à celles obtenues pour un mélange gazeux équivalent. Dans ces conditions, les gouttes se sont donc totalement évaporées en amont du front de flamme. Pour des mélanges riches contenant de plus grosses gouttes ($d_i \geq 30 \mu\text{m}$), par contre, les tendances varient quelque peu. Seuls les profils obtenus avec de grosses gouttes seront donc présentés par la suite.

La Figure 3.30 et la Figure 3.31 rassemblent respectivement les tendances décrites par la fraction molaire d'éthanol et de dioxygène pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_l \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent.

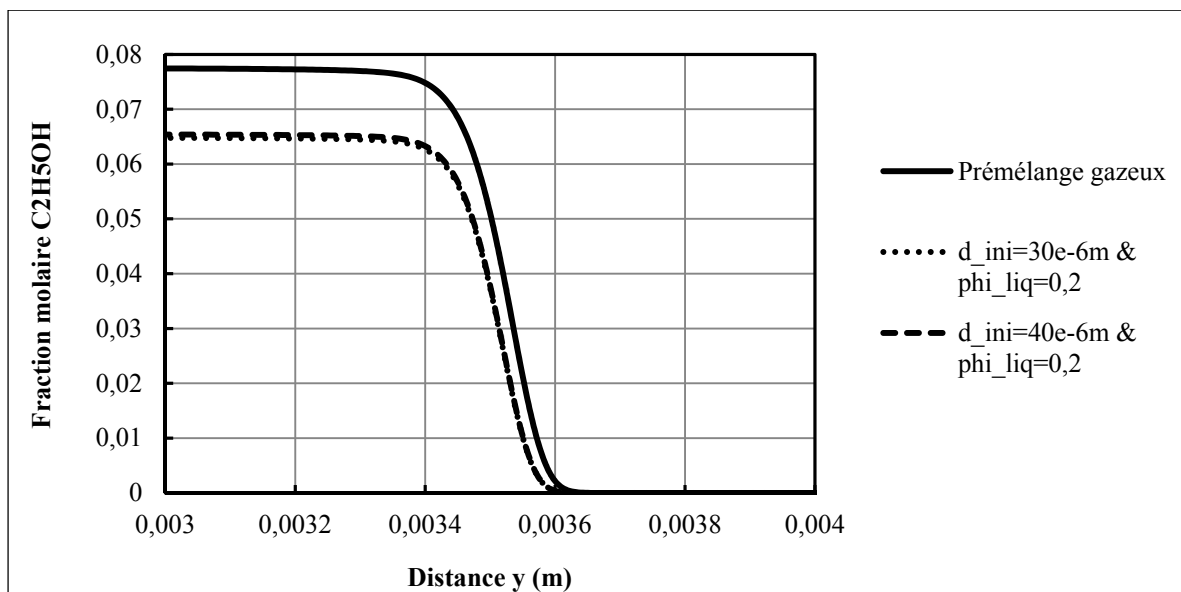


Figure 3.30 Évolution de la fraction molaire d'éthanol dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_l \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent

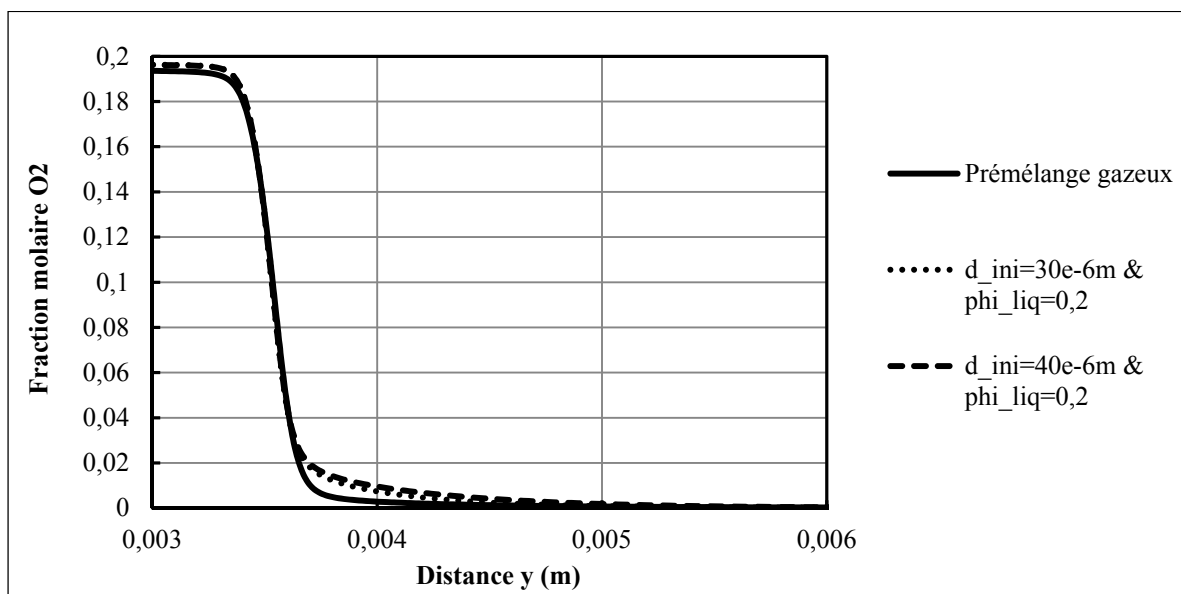


Figure 3.31 Évolution de la fraction molaire de dioxygène dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_l \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent

La superposition des courbes de la Figure 3.30 montre que pour les gouttes de 30 et 40 μm les profils restent éloignés du profil du mélange gazeux équivalent. Cet écart traduit l'évaporation tardive des gouttes. Ce constat se retrouve sur la Figure 3.31 puisque, pour des grosses gouttes ($d_i \geq 30 \mu\text{m}$), l'oxydation semble se poursuivre sur une plus grande longueur. La fraction molaire d' O_2 s'annule en effet vers $y = 5 \text{ mm}$ quand $d_i = 40 \mu\text{m}$, alors que pour le prémélange gazeux équivalent elle s'annule un peu plus tôt dans le domaine.

Ici, l'évaporation tardive des gouttes amène à des mélanges gazeux dont la richesse est inférieure à ϕ_o (en amont de la flamme). Or, dans le cas de mélanges riches, cette diminution de richesse rapproche le mélange gazeux (qui va brûler) de la stœchiométrie, richesse vers laquelle les mélanges réagissent le plus intensément (vitesse de flamme maximale pour une richesse légèrement supérieure à un). Ceci se retrouve sur la Figure 3.32 qui illustre l'évolution du débit volumique de chaleur dégagée dans la zone avoisinant le front de flamme.

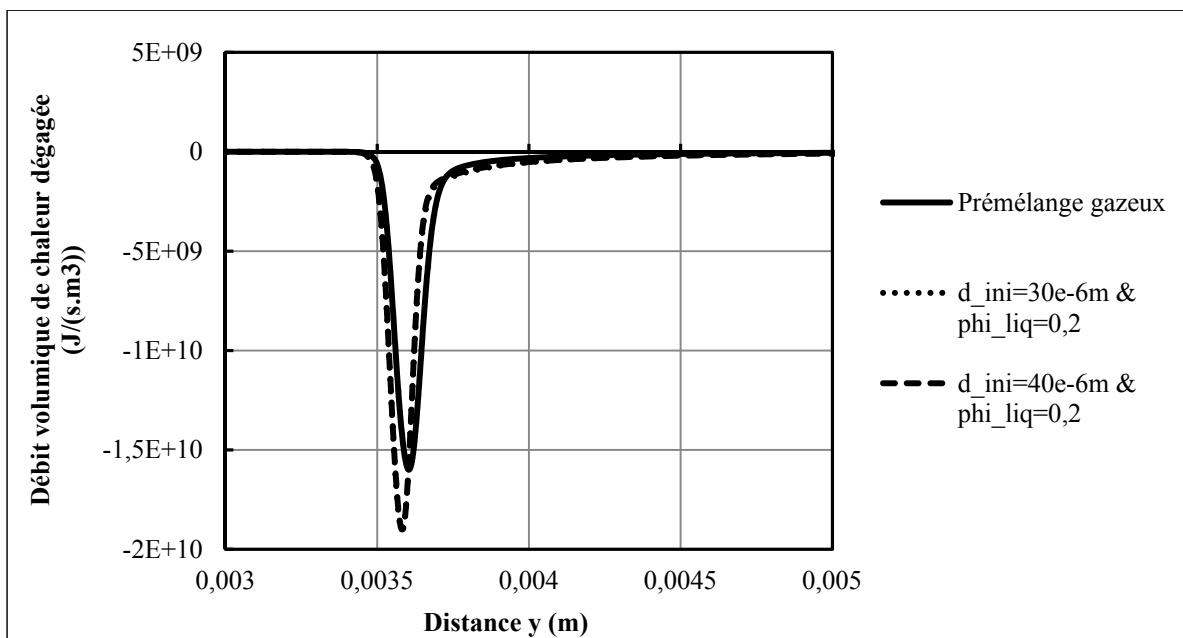


Figure 3.32 Évolution du débit volumique de chaleur dégagée dans la zone avoisinant le front de flamme pour des mélanges diphasiques avec d_i de 30 et 40 μm , $\phi_o = 1,2$ et $\phi_l \leq 0,2$, et pour le prémélange gazeux équivalent

La Figure 3.32 montre que pour des gouttes de 30 et 40 μm le pic est plus élevé : on note une augmentation d'environ 18% de l'amplitude du pic. Ceci confirme que les réactions sont plus intenses dans ces conditions.

Pour les profils de température, les variations sont faibles et les profils se superposent quasi parfaitement. Ainsi, pour les mélanges riches, l'évaporation tardive des grosses gouttes ne se voit pas sur ces profils.

Variation pression

Les courbes obtenues à chaque pression (pour $d_i = 8 \mu\text{m}$ et $\phi_\ell = 0,2$) se superposent quasi parfaitement à celles des mélanges gazeux équivalents. L'évaporation des gouttes est donc complète en amont de la flamme. Ce constat fait écho aux observations de Nomura et al. (2007) qui expliquaient que l'augmentation de la pression accélère l'évaporation des gouttes et réduit donc leur longueur de pénétration dans la flamme. Notons tout de même que les pics de dégagement d'énergie pour les mélanges diphasiques restent plus faibles que ceux obtenus pour des mélanges gazeux.

Bilan

Au final, les résultats du modèle ont montré que :

- Pour les mélanges diphasiques pauvres comme riches, les profils obtenus se superposent quasi parfaitement à celui du mélange gazeux équivalent quand d_i reste faible. L'évaporation s'est donc déroulée complètement et en amont de la flamme. Cette évolution se retrouve quelle que soit P_u .
- Pour des grosses gouttes, les profils s'éloignent de la courbe décrite par le mélange gazeux équivalent. L'évaporation des gouttes se fait donc tardivement et les gouttes pénètrent dans la flamme.
- La présence de grosses gouttes provoque une diminution du pic de dégagement d'énergie, pour les mélanges pauvres, et une augmentation pour les mélanges riches. Ceci vient de l'appauvrissement de la zone de réaction.

Ces conclusions concordent avec celles des sections 3.2.2 à 3.2.5 et montrent que ϕ_{eff} est un bon indicateur concernant l'évaporation des gouttes.

3.3 Corrélations pour la vitesse de flamme

À partir des résultats présentés dans ce chapitre, nous avons essayé de trouver une corrélation permettant de retrouver les tendances obtenues numériquement. Le logiciel STATGRAPHICS Centurion XVI (2013) a été utilisé. Une corrélation pour le cas gazeux a d'abord été recherchée avec la méthode de Marquardt. Nous inspirant des diverses corrélations proposées dans la littérature (Gulder (1984), Liao et al. (2007), Broustail (2012)), nous avons obtenu la corrélation suivante à partir des résultats de simulation (équation (3.4)) :

$$S_{L,gaz} = \theta_1 (\theta_2 (\phi - 1)^2 + \theta_3 (\phi - 1) + 1) \left(\theta_4 \left(\frac{P_u}{P_{ref}} \right)^2 + \theta_5 \left(\frac{P_u}{P_{ref}} \right) \right)^\psi \quad (3.4)$$

avec :

- $\psi = \theta_6 * \phi^{\theta_7}$, l'exposant de la corrélation;
- $S_{L,gaz}$, la vitesse de flamme pour un mélange gazeux (exprimée en cm/s) à une température initiale de 300 K;
- ϕ , la richesse du mélange gazeux;
- P_u , la pression du mélange frais (exprimée en bar et comprise entre 1 et 10 bar);
- P_{ref} (= 1 bar), la pression de référence;
- $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5, \theta_6$ et θ_7 , les constantes de la corrélation définies comme suit :

Tableau 3.6 Valeurs des constantes de la corrélation développée pour les flammes en milieu gazeux

Constantes	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5	θ_6	θ_7
$\phi \leq 1$	80,349	-3,254	-0,039	4,855	17,305	-0,203	-0,514
$\phi > 1$	41,171	-4,441	0,766	0,174	0,694	-0,198	1,244

Les résultats obtenus avec cette corrélation sont très proches de ceux calculés numériquement. L'écart absolu moyen est seulement de 0,2 cm/s (soit un écart relatif moyen de 0,8%). Les écarts relatifs minimum et maximum, quant à eux, s'élèvent respectivement à 0,0% et 3,3%.

Pour prendre en compte les effets liés à la présence de gouttes une nouvelle corrélation a été développée à partir des résultats numériques obtenus pour des mélanges diphasiques. La nouvelle formule est présentée par l'équation (3.5).

$$S_{L,diph} = (\theta_1' d_i^3 + \theta_2' d_i^2 + \theta_3' d_i) \left(\theta_4' \left(\frac{\phi_\ell}{\phi_o} \right)^2 + \theta_5' \left(\frac{\phi_\ell}{\phi_o} \right) + \theta_6' \right) + S_{L,gaz} \quad (3.5)$$

avec :

- $S_{L,diph}$, la vitesse de flamme du mélange diphasique (exprimée en cm/s) ;
- d_i , le diamètre initial des gouttes (exprimé en μm) ;
- $\theta_1', \theta_2', \theta_3', \theta_4', \theta_5'$ et θ_6' les constantes de la corrélation données dans le Tableau 3.7.

Les tendances, très variables selon les conditions de mélange, nous ont obligés à définir différentes constantes. La découpe des sous-cas a été réalisée en se basant sur les tendances décrites dans ce chapitre.

Tableau 3.7 Valeurs des constantes de la corrélation développée pour les flammes en milieu diphasique

Constantes	$d_i \leq 11 \mu\text{m}$			$d_i > 11 \mu\text{m}$		
	$\phi_o \leq 1$	$\phi_o > 1$		$\phi_o \leq 1$	$\phi_o > 1$	
	$\forall \phi_\ell$	$\phi_\ell < 0,15$	$\phi_\ell \geq 0,15$	$\forall \phi_\ell$	$\phi_\ell < 0,15$	$\phi_\ell \geq 0,15$
θ_1'	0,178	-0,470	-0,443	0,004	-0,108	-0,097
θ_2'	-4,196	1,642	-11,516	-0,233	6,286	4,389
θ_3'	34,532	43,334	187,289	-2,255	-65,429	37,393
θ_4'	0,020	-0,214	-1,510	-0,219	-0,146	-0,059
θ_5'	-0,058	-0,030	0,579	0,242	0,062	0,018
θ_6'	-0,003	-0,001	-0,060	-0,007	0,000	0,000

Notons que cette corrélation a été établie pour des mélanges avec $T_u = 300$ K, $P_u = 2$ bar, d_i inférieur à $45 \mu\text{m}$, ϕ_ℓ comprise entre 0,04 et 0,3 et ϕ_o entre 0,7 et 1,4. Elle a aussi été testée pour les cas où P_u varie entre 2 et 10 bar, $T_u = 300$ K, $d_i = 8 \mu\text{m}$, $\phi_\ell = 0,2$ et ϕ_o entre 0,7 et 1. L'écart absolu moyen de la corrélation finale n'est que de $0,3$ cm/s (soit un écart relatif moyen de 1,3%). Notons aussi que l'écart relatif minimum s'élève à 0,0% et l'écart relatif maximal à 10,9%. Le fait d'avoir découpé les résultats en plusieurs cas crée cependant des discontinuités dans la corrélation. Dans cette étude, il ne sera pas possible de raffiner la corrélation autour de ces points, par manque de résultats numériques.

La tendance décrite par S_L en fonction de d_i a été représentée sur la Figure 3.33. La superposition des résultats du modèle à ceux de la corrélation confirme que la corrélation est très proche des points du modèle. Des améliorations restent encore à apporter pour les d_i élevés puisqu'il semblerait que la corrélation tende à s'éloigner des points numériques.

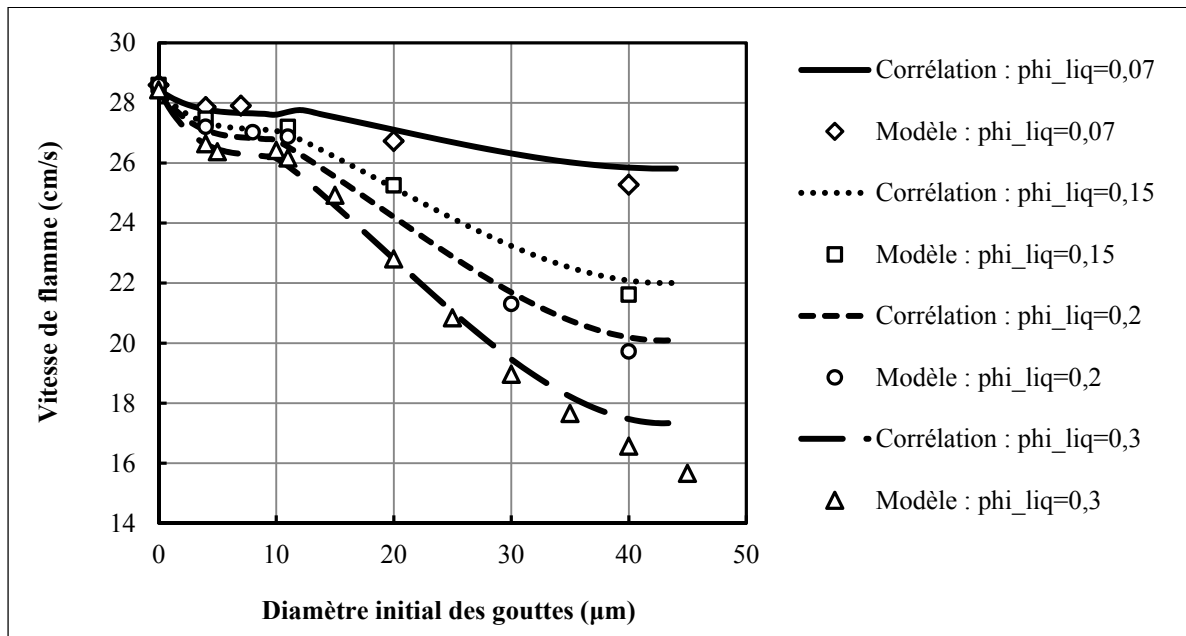


Figure 3.33 Comparaison de la corrélation aux résultats numériques - S_L vs d_i

3.4 Bilan

Les résultats numériques obtenus avec le modèle concordent en grande partie avec les tendances que l'on retrouve dans la littérature. Les écarts constatés peuvent notamment être attribués au choix de température et à la distance d'injection des gouttes. Ce bilan positif nous permet de valider le modèle en diphasique. Le manque de données expérimentales ne nous a pas permis d'affiner cette validation mais il serait intéressant de se pencher sur la question dans un futur travail sur le sujet.

Les analyses menées dans ce chapitre, nous ont notamment permis de remarquer que, selon les conditions de mélange, la structure de la flamme change (épaississement ou affinement du front de flamme) et l'évaporation se fait plus ou moins tardivement. À faible diamètre, nous avons pu constater que les gouttes s'évaporent complètement en amont de la flamme, provoquant ainsi des flammes similaires aux flammes gazeuses équivalentes. Malgré une structure relativement identique, la vitesse de flamme d'un mélange diphasique avec de petites gouttes est toujours plus faible que la vitesse de flamme d'un mélange gazeux équivalent. D'après ce qui a été expliqué précédemment, il semblerait que ceci soit dû au caractère endothermique de l'évaporation de gouttes qui refroidit quelque peu le mélange (Neophytou, 2010). À contrario, pour les grosses gouttes, l'évolution diffère selon la richesse totale du mélange :

- Pour des mélanges globalement pauvres, les grosses gouttes provoquent une réduction de la richesse effective, une diminution de l'intensité des réactions et une augmentation de l'épaisseur de flamme.
- Pour des mélanges globalement riches, les grosses gouttes provoquent aussi une réduction de la richesse effective, ce qui rapproche le mélange de la stœchiométrie, condition dans laquelle les réactions sont les plus intensives et la flamme plus fine.

L'augmentation de pression, quant à elle, entraîne une diminution de l'épaisseur de flamme et a peu d'influence sur la richesse effective. Finalement, l'analyse de ces tendances nous a permis de répondre au deuxième et troisième sous-objectif de ce mémoire.

En fin de chapitre, des corrélations ont aussi été proposées. Celles-ci permettent de retrouver simplement les tendances et les résultats obtenus avec le modèle. L'écart relatif moyen pour les corrélations en diphasique est de 1,3%. Ces corrélations répondent donc au dernier sous-objectif de ce mémoire.

CONCLUSION

L'objectif principal de ce mémoire a été d'évaluer numériquement l'influence des gouttes d'éthanol sur la propagation d'une flamme laminaire prémélangée.

Le premier chapitre a ainsi permis de faire un état de l'art. La revue de la littérature a révélé que l'influence des gouttes est différente selon les conditions régnant dans le mélange diphasique (richesse liquide et totale, diamètre des gouttes, pression). Des désaccords entre les groupes de recherche ont notamment été révélés au cours de ce chapitre. Nous avons d'ailleurs fait l'hypothèse que ces différences entre les résultats étaient probablement dues aux procédures expérimentales. Le manque de données sur les conditions expérimentales (et notamment sur la température des gaz frais) a aussi été souligné afin que les tendances de la littérature soient considérées avec précaution.

Le chapitre 2 a ensuite été consacré à la définition du modèle. Les limites du problème y ont été définies : la propagation libre de flammes prémélangées et monodimensionnelles dans des milieux diphasiques à 300 K a été étudiée ici. Les hypothèses simplificatrices, les équations, les conditions aux limites et la cinétique chimique ont ensuite été détaillées. Quelques précisions sur la méthode numérique ont également été apportées dans ce chapitre. Ce développement nous a permis de mieux comprendre les phénomènes mis en jeu. Par la suite, la démarche de paramétrage du modèle a été détaillée. Il a notamment été expliqué que les paramètres numériques ont été choisis de manière à obtenir des résultats respectant les conditions aux limites du problème, tout en permettant un compromis « précision/temps de calcul ». La détermination de ces paramètres a été réalisée en se basant sur les résultats issus de l'étude de sensibilité et en s'inspirant de la littérature. Avec le maillage final, le front de flamme est largement discrétisé et les conditions de gradient nul aux frontières sont vérifiées. Une procédure itérative de paramétrage a même été définie. Celle-ci vise à guider la convergence pour les cas diphasiques et à réduire les temps de calcul. Le seul inconvénient de cette procédure est qu'elle oblige l'utilisateur à découper son calcul en plusieurs sous-calculs intermédiaires. À la fin de ce chapitre, une partie a été consacrée à la validation du

modèle. Cette étape a révélé que le modèle semble mener à des résultats reproduisant qualitativement les mesures expérimentales.

Dans le dernier chapitre, les résultats numériques ont été présentés et analysés. L'évolution de la vitesse de flamme en fonction des conditions de mélange (richesse liquide et totale, diamètre des gouttes et pression) a été étudiée en détails. Les résultats numériques obtenus avec le modèle concordent en partie avec les tendances retrouvées dans la littérature. Les analyses ont notamment révélé que l'augmentation du diamètre initial des gouttes et de la richesse liquide a un effet significatif sur la vitesse de flamme. Il s'est en effet avéré que les grosses gouttes (diamètre supérieur à $11 \mu\text{m}$) s'évaporent « moins bien » et pénètrent dans la flamme. Cette évaporation tardive induit une diminution de la richesse effective ayant diverses répercussions :

- pour les mélanges globalement pauvres, une diminution de l'intensité des réactions, un épaississement et un ralentissement de la flamme;
- pour les mélanges globalement riches, un rapprochement de la stœchiométrie provoquant des réactions plus intenses, un affinement et une accélération de la flamme.

Pour de petites gouttes (de $8 \mu\text{m}$ de diamètre), l'augmentation de la pression conduit en outre à des richesses effectives proches des richesses totales et favorisant l'évaporation. La flamme diphasique se comporte alors comme la flamme gazeuse équivalente.

En fin de chapitre, des corrélations permettant de retrouver simplement les résultats du modèle ont été proposées. Il serait intéressant d'améliorer ces corrélations en étudiant plus de cas. L'ajout de résultats permettrait notamment de réduire les discontinuités.

Au final, ce modèle a permis de bien cerner l'influence des gouttes sur la propagation de la flamme. Les références littéraires, assez rares et en désaccord sur plusieurs points, n'ont permis que de simples comparaisons. Il serait ainsi intéressant de mener de nouvelles études expérimentales où la température des gaz frais serait indiquée et fixée. Elles permettraient de recréer approximativement les conditions du modèle. Il serait ainsi possible de quantifier les erreurs induites par le modèle numérique.

RECOMMANDATIONS

Plusieurs nouvelles recommandations sont proposées dans cette partie pour d'éventuels travaux futurs. Celles-ci concernent le modèle théorique et les cas supplémentaires qu'ils seraient bon d'étudier.

Modèle théorique

Comme expliqué dans le chapitre 2, le modèle développé dans cette étude est simplifié et très limité. Il serait ainsi intéressant de complexifier le problème et de quantifier les variations induites par ces modifications. La prise en compte des turbulences serait par exemple un bon point d'amélioration.

La géométrie de la chambre de combustion devrait également être considérée pour se rapprocher des conditions réelles régnant dans les moteurs industriels. Dans ce cas, les calculs ne seraient plus effectués dans le cadre d'une propagation libre. L'influence des parois pourrait être étudiée.

Dans cette étude, la phase liquide était représentée par un spray homogène constitué de gouttes de même taille. Dans la réalité, les injecteurs industriels conduisent à un spray non homogène et constitué de gouttes dont les tailles varient. Cette répartition des gouttes aurait probablement un certain impact sur les résultats numériques.

Une étude CFD (« *Computational Fluid Dynamics* ») de la propagation de flammes (bidimensionnelles ou tridimensionnelles) en milieu diphasique serait aussi un sujet de recherche intéressant. Une telle étude permettrait d'observer avec plus de précision les changements structurels induits par la présence de gouttes sur la flamme. Avec de tels modèles, cependant, il serait difficile de conserver une cinétique détaillée car les temps de calcul seraient trop élevés.

Cas supplémentaires

Du point de vue numérique, il serait intéressant de reprendre le modèle et de le tester pour de nouvelles conditions. L'étude de mélanges diphasiques contenant de grosses gouttes et soumis à de hautes pressions permettraient, par exemple, de compléter notre étude portant sur la variation de la pression.

La variation de la nature du carburant ajouterait également un paramètre d'étude. Dans la littérature, de multiples études concernent la combustion des mélanges d'essence et d'éthanol dans l'air (mélanges couramment utilisés en automobile). Une étude numérique sur la propagation de ces flammes en milieu diphasique serait donc pertinente.

Expériences

Comme nous avons pu le voir, la littérature manque d'études expérimentales. Il serait ainsi important de compléter les recherches expérimentales actuelles par une étude permettant de contrôler plus aisément tous les paramètres de mélange. Plusieurs techniques nous ont semblé particulièrement intéressantes pour recréer un environnement diphasique :

- La suspension de gouttes à l'extrémité de fines fibres pourrait être un bon point de départ (même si la fibre a un certain impact sur l'évaporation des gouttes).
- L'utilisation d'un nébuliseur permettrait aussi d'obtenir un nuage de gouttes en suspension.

Pour la deuxième technique il serait conseillé de s'inspirer du fonctionnement des instruments utilisant la technique spectroscopique d'absorption atomique des flammes. Dans ces derniers le nébuliseur est directement intégré à un brûleur assurant l'homogénéisation du mélange diphasique. Un tel montage permettrait aussi de contrôler la taille des gouttes, la pression et la température du mélange frais. Avec une caméra haute vitesse il serait ensuite possible de calculer la vitesse de flamme. L'utilisation de la méthode Schlieren permettrait aussi de mesurer le diamètre des gouttes.

ANNEXE I

EQUIVALENCE DES NOTATIONS

Hayashi et al. (1975; 1976), préfèrent étudier l'évolution de la vitesse de flamme en fonction des concentrations en carburant. Ils notent ainsi :

- $\lambda_o = N_{f,o} / N_a$, la concentration molaire totale en carburant avec N_a , le nombre de moles d'air dans le mélange et $N_{f,o}$ ($= N_{f,\ell} + N_{f,g}$) la quantité totale de carburant (quelle que soit la phase) ;
- $\lambda_\ell = N_{f,\ell} / N_a$, la concentration molaire en carburant liquide avec $N_{f,\ell}$, la quantité de carburant liquide dans le mélange ;
- $\lambda_g = \lambda_o - \lambda_\ell = N_{f,g} / N_a$, la concentration molaire en vapeur de carburant avec $N_{f,g}$, la quantité de carburant gazeux dans le mélange.

Il est possible d'exprimer les richesses en fonction des concentrations en carburant et ainsi de trouver une équivalence entre les notations :

$$\phi_o = \frac{\lambda_o}{\lambda_{st}} \text{ et } \phi_\ell = \frac{\lambda_\ell}{\lambda_{st}}$$

avec λ_{st} la concentration à la stœchiométrie (qui se calcule directement à partir des coefficients de la réaction stœchiométrique).

Gauthier, Bardon et Rao (1996) et Ballal et Lefebvre (1981), quant à eux, ont opté pour la fraction massique de vapeur de carburant ($\Omega = m_{f,g} / m_{f,o} = \phi_g / \phi_o$), alors que Lin, Law et Chun (1988) et Lin et Sheu (1991) ont choisi d'utiliser la fraction massique de carburant liquide (soit $1 - \Omega$, avec les notations actuelles).

Avec les relations détaillées ci-dessus, il est ainsi possible de ramener les tendances collectées dans la littérature aux mêmes paramètres d'étude.

ANNEXE II

QUANTITÉS DE BASE

Les écoulements réactifs contiennent plusieurs composants. La composition de tels systèmes physiques est variable puisqu'elle dépend de la diffusion massique et des réactions chimiques. Pour quantifier la composition d'un système « multicomposant », plusieurs grandeurs ont été introduites (cf. manuel de COSILAB) :

- les fractions massiques : Y_k , $k = 1, \dots, K$ avec K , le nombre d'espèces chimiques dans le système. Pour lesquelles, on a les relations suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} Y_k = \frac{m_k}{m_g} = \frac{m_k}{\sum_{i=1}^K m_i} \\ \sum_{k=1}^K Y_k = 1 \end{array} \right. \quad (\text{A II-1})$$

Avec : m_g la masse totale du mélange gazeux et m_k les masses respectives des espèces k .

Les fractions massiques permettent de se faire une idée de la composition du mélange en termes de proportions massiques. Elles peuvent aussi être écrites en fonction des masses volumiques :

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho_g} = \frac{\rho_k}{\sum_{i=1}^K \rho_i} \quad (\text{A II-2})$$

- les fractions molaires : X_k qui sont par définition le ratio du nombre de moles de l'espèce k , N_k , sur le nombre total de moles contenues dans le mélange, N .

$$\left\{ \begin{array}{l} X_k = \frac{N_k}{N_g} = \frac{N_k}{\sum_{i=1}^K N_i} \\ \sum_{k=1}^K X_k = 1 \end{array} \right. \quad (\text{A II-3})$$

Pour passer de la fraction molaire à la fraction massique, la formule suivante peut être utilisée :

$$Y_k = \frac{W_k}{W_g} X_k \quad (\text{A II-4})$$

Où W_k représente la masse molaire de l'espèce k , et W_g la masse molaire totale du mélange :

$$W_g = \left(\sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} = \sum_{k=1}^K X_k W_k \quad (\text{A II-5})$$

- les concentrations molaires C_k dont la somme vaut la concentration molaire du mélange :

$$C_g = \sum_{k=1}^K C_k \quad (\text{A II-6})$$

Elles sont reliées aux fractions massiques par la relation suivante :

$$C_k = \frac{\rho_g Y_k}{W_k} \quad (\text{A II-7})$$

Avec ρ_g la masse volumique du mélange.

- les masses volumiques partielles ρ_k données par la formule suivante :

$$\rho_k = Y_k \rho_g \quad (\text{A II-8})$$

- les pressions partielles P_k données par la formule suivante :

$$P_k = X_k P \quad (\text{A II-9})$$

Avec P la pression du mélange.

La vitesse et la pression sont des grandeurs de base de la mécanique des fluides. La vitesse est une grandeur vectorielle dont les trois composantes u , v et w représentent la vitesse suivant les trois directions principales du système de coordonnées. La pression, P , est quant à elle une grandeur scalaire qui combine plusieurs types de contributions : celles de la thermodynamique, de l'acoustique et de la mécanique des fluides. Dans le cas des déflagrations, cependant, les deux dernières contributions s'avèrent être négligeables puisque l'écoulement se fait à faible nombre de Mach. Ainsi, la thermochimie de ce type d'écoulement peut être décrite en utilisant la pression thermodynamique seule.

ANNEXE III

PROPRIÉTÉS DES GOUTTES

Dans cette annexe, les équations présentées ont été tirées du manuel de COSILAB et de l'article d'Abramzon et Sirignano (1989).

Propriétés du liquide

Les propriétés du liquide sont considérées comme étant fonction de la température. La pression de vapeur saturante est :

$$P_{sat} = P_{ref} \exp\left(\frac{L_v}{R/W_F} \left[\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s}\right]\right) \quad (\text{A III-1})$$

Où P_{sat} est en bar et la température de surface de la goutte T_s en Kelvins. P_{sat} est déduite de la relation de Clausius-Clapeyron dans laquelle L_v est la chaleur latente spécifique de vaporisation au point d'ébullition, R est la constante universelle des gaz parfaits, P_{ref} la pression saturante de référence (ici 1 bar), T_{ref} la température saturante de référence (ici la température d'ébullition, T_{ebull}), et W_F la masse molaire du carburant.

Par définition, la fraction molaire de la vapeur de l'espèce liquide à la surface de la goutte s'écrit :

$$X_{Fs} = \frac{P_{sat}}{P} \quad (\text{A III-2})$$

D'où:

$$X_{Fs} = \frac{P_{ref}}{P} \exp\left(\frac{L_v}{R/W_F} \left[\frac{1}{T_{ref}} - \frac{1}{T_s}\right]\right) \quad (\text{A III-3})$$

La chaleur latente spécifique de vaporisation, $L(T_s)$, est exprimée comme suit :

$$L(T_s) = L_v \left(\frac{T_{crit} - T_s}{T_{crit} - T_{ebull}} \right)^{0,38} \quad (\text{A III-4})$$

Avec T_{crit} la température critique de la goutte de liquide et T_{ebull} sa température d'ébullition.

Le coefficient de diffusion de la vapeur de liquide D_F , sa conductivité thermique k_F , sa viscosité dynamique μ_F et sa chaleur spécifique à pression constante c_{pF} sont calculés à partir des tables de données thermodynamiques et moléculaires, et en utilisant des régressions polynomiales en température générées par le précompilateur ChemTra de COSILAB.

Propriétés de film

L'évaluation des propriétés physiques moyennes dans le film entourant une goutte est importante pour la détermination du taux d'évaporation. L'usage consiste à calculer les propriétés physiques du mélange gazeux à la température et à la concentration suivante :

$$\bar{T} = T_s + A_r (T_s - T_\infty) \quad (\text{A III-5})$$

$$\bar{Y}_F = Y_{Fs} + A_r (Y_{Fs} - Y_{F\infty}) \quad (\text{A III-6})$$

Avec \bar{T} la température moyenne de film et \bar{Y}_F la fraction massique moyenne de vapeur du liquide dans le film. T_∞ et $Y_{F\infty}$ désignent respectivement la température et la fraction massique de la vapeur de liquide à l'extérieur du film, et A_r est la constante de moyenne. Dans l'étude actuelle, la valeur recommandée par Hubbard, Denny et Mills (1975) et Yuen et Chen (1976) a été adoptée : $A_r = 1/3$ (règle 1/3).

Selon Abramzon et Sirignano (1987), la masse volumique du film et la chaleur spécifique à pression constante du film sont déterminées à partir des propriétés respectives des espèces pures et en utilisant les règles additives standard pour un gaz idéal :

$$\overline{\rho_g} = \frac{1}{\sum_{k=1}^K (\overline{Y_k} / \overline{\rho_k})} \quad (\text{A III-7})$$

$$\overline{c_{pg}} = \sum_{k=1}^K (\overline{c_{pk}} \overline{Y_k}) \quad (\text{A III-8})$$

où : $\overline{Y_k}$ est la fraction massique de l'espèce k dans le film; $\overline{\rho_k}$ sa masse volumique dans le film; $\overline{c_{pk}}$ sa chaleur spécifique à pression constante dans le film.

La viscosité dynamique $\overline{\mu_g}$ et la conductivité thermique $\overline{k_g}$ de film sont déterminées à partir des propriétés respectives des espèces pures.

ANNEXE IV

THÉORIE DE FILM

Comme dans les autres modèles approchés, le modèle de film suppose, le long de la surface de la goutte, une uniformité de la température et de la concentration de la vapeur de liquide et des autres espèces. Cette hypothèse peut causer une certaine sous-estimation du taux d'évaporation des gouttes. Le film est aussi supposé sphérique, fin et quasi stationnaire. Ainsi, d'après Abramzon et Sirignano (1989), pour une particule sphérique de diamètre d , les épaisseurs du film thermique et diffusif sont calculées de la manière suivante :

$$\delta_T^* = \frac{d}{Nu^* - 2} \quad \delta_M^* = \frac{d}{Sh^* - 2} \quad (\text{A IV-1})$$

Où $Nu^* = (Re, Pr)$ et $Sh^* = (Re, Sc)$ sont respectivement les nombres de Nusselt et de Sherwood; Pr le nombre de Prandtl et Sc le nombre de Schmidt (définis dans l'équation (A IV-5)). L'exposant * désigne les propriétés estimées sans prendre en compte l'effet de la convection (sur les transferts de masse et de chaleur entre la goutte et le gaz). La corrélation adoptée pour le nombre de Nusselt et de Sherwood est celle de Clift, Grace et Weber (1978) :

$$Nu^* = 1 + (1 + Re \cdot Pr)^{1/3} \max(1, Re)^{0,077} \quad (\text{A IV-2})$$

$$Sh^* = 1 + (1 + Re \cdot Sc)^{1/3} \max(1, Re)^{0,077} \quad (\text{A IV-3})$$

avec :

$$Re = \frac{\rho_\infty |v_r| d}{\mu_g}, \quad 1 \leq Re \leq 400 \quad (\text{A IV-4})$$

$$\begin{cases} Pr = \frac{\mu_g c_{pg}}{k_g} \\ Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g D_g} \end{cases}, \quad 0,25 \leq Pr, Sc \leq 100 \quad (\text{A IV-5})$$

où : ρ_∞ est la masse volumique de l'écoulement libre (loin de la goutte); v_r est la vitesse relative de la goutte par rapport à la phase gazeuse; et $\overline{c_{pg}}$ la chaleur spécifique moyenne du mélange gazeux dans le film.

Ces équations sont de bonnes approximations (erreur inférieure à 3% d'après Abramzon et Sirignano (1989)), mais ignorent les effets de convection. Ces derniers influencent en effet la valeur de δ_T et δ_M puisqu'ils entraînent l'épaississement de la couche limite laminaire qui entoure la goutte. Pour intégrer cet effet aux équations, les facteurs de correction F_T et F_M seront utilisés (Abramzon et Sirignano, 1989) :

$$\delta_T = F_T \delta_T^* \quad \delta_M = F_M \delta_M^* \quad (\text{A IV-6})$$

L'expression détaillée de ces facteurs est donnée dans l'équation (A IV-12). Les nombres de Sherwood et de Nusselt corrigés sont définis de la manière suivante dans l'étude d'Abramzon et Sirignano (1989) :

$$\text{Sh}_c = 2 + \frac{\text{Sh}^* - 2}{F_M} = 2 + \left[(1 + \text{Re} \cdot \text{Sc})^{1/3} \max(1, \text{Re})^{0,077} - 1 \right] \frac{B_M (1 + B_M)^{-0,7}}{\ln(1 + B_M)} \quad (\text{A IV-7})$$

$$\text{Nu}_c = 2 + \frac{\text{Nu}^* - 2}{F_T} = 2 + \left[(1 + \text{Re} \cdot \text{Pr})^{1/3} \max(1, \text{Re})^{0,077} - 1 \right] \frac{B_T (1 + B_T)^{-0,7}}{\ln(1 + B_T)} \quad (\text{A IV-8})$$

Le modèle de film amène donc aux expressions suivantes pour le taux d'évaporation instantané des gouttes (Abramzon et Sirignano, 1989) :

$$\dot{m}_d = \pi d \overline{\rho_g} D_g \text{Sh}_c \ln(1 + B_M) \quad (\text{A IV-9})$$

et

$$\dot{m}_d = \pi d \frac{\overline{k_g}}{c_{pF}} \text{Nu}_c \ln(1 + B_T) \quad (\text{A IV-10})$$

avec $\overline{\rho}_g$, \overline{D}_g et \overline{k}_g la densité moyenne, le coefficient binaire moyen et la conductivité thermique moyenne du mélange gazeux dans le film; \overline{c}_{pF} la capacité calorifique moyenne de la vapeur de l'espèce liquide (ici le carburant) dans le film.

Dans les deux dernières équations, B_M et B_T sont respectivement les nombres de Spalding pour le transfert de masse et de chaleur (Abramzon et Sirignano, 1989) :

$$B_M = \frac{Y_{Fs} - Y_{F\infty}}{1 - Y_{Fs}} \quad B_T = \frac{\overline{c}_{pF}(T_\infty - T_s)}{L(T_s) + \dot{q}/\dot{m}_d} \quad (\text{A IV-11})$$

avec :

- $Y_{F\infty}$ la fraction massique de la vapeur de liquide loin de la goutte,
- Y_{Fs} la fraction massique de la vapeur de liquide à la surface de la goutte qui est calculée avec l'équation de Clausius Clapeyron (cf. ANNEXE III),
- T_∞ la température à l'extérieur du film entourant la goutte, c'est-à-dire la température locale et instantanée de la phase gazeuse,
- $L(T_s)$ la chaleur latente spécifique de vaporisation à T_s , définie dans l'ANNEXE III.

Selon Abramzon et Sirignano (1987; 1989), les facteurs de correction F_T et F_M (vus plus haut) peuvent être écrits comme suit : $F_T = F(B_T)$ et $F_M = F(B_M)$ avec F la fonction universelle :

$$F = (1 + B)^{0,7} \frac{\ln(1 + B)}{B} \quad (\text{A IV-12})$$

Au final, du point de vue de la théorie de film, la convection affecte les taux de transfert de chaleur et de masse de deux façons : elle déforme les profils de température et de concentration dans le film et entraîne l'augmentation (ou la réduction) de l'épaisseur du film lors de l'évaporation (ou de la condensation).

L'expression du flux total de chaleur traversant la surface entourant une goutte rassemble les contributions de la conduction dans la goutte, de la convection et du changement d'état (chaleur latente spécifique de vaporisation). En reprenant l'expression de B_T (équation (A IV-11)), on obtient l'expression suivante pour le transfert de chaleur dans la goutte :

$$\dot{q} = \dot{m}_d \left[\frac{\overline{c_{pF}}(T_\infty - T_s)}{B_T} - L(T_s) \right] \quad (\text{A IV-13})$$

avec :

$$B_T = (1 + B_M)^\phi - 1 \quad (\text{A IV-14})$$

et

$$\phi = \frac{\overline{c_{pF}}}{\overline{c_{pg}}} \frac{\text{Sh}_c}{\text{Nu}_c} \frac{1}{\text{Le}} \quad (\text{A IV-15})$$

Où Le est le nombre de Lewis : $\text{Le} = \overline{\alpha_g} / \overline{D_g}$ avec $\overline{\alpha_g} = \overline{k_g} / (\overline{\rho_g c_{pg}})$ la diffusivité thermique du film; et $\overline{c_{pg}}$ la chaleur spécifique moyenne du mélange gazeux dans le film.

À la surface de la goutte, le phénomène de convection forcé peut affecter l'évaporation de la goutte : épaissement du film entourant la goutte, augmentation du taux de combustion, perte de sphéricité de la goutte, ... Cependant, pour des raisons de simplicité, la majorité des corrélations pour le taux de combustion et le transfert massique négligent ces changements et utilisent des valeurs moyennes pour la goutte.

ANNEXE V

DIFFÉRENCES FINIES

La solution d'un problème stationnaire peut être obtenue en résolvant les équations principales en régime établi directement ou en résolvant une version du problème dépendant du temps jusqu'à ce que l'état stationnaire soit approché. Dans cette étude, la deuxième démarche sera privilégiée.

La résolution du problème par rapport au temps se fait par itérations. Au premier pas de temps ($p=0$; $t_i=t^0=0$ s), les profils saisis par l'utilisateur sont utilisés pour lancer les calculs. À l'itération suivante ($p=1$; $t=t^1$), le problème est résolu et la solution obtenue est ensuite utilisée pour résoudre le problème au temps t^2 . La résolution est considérée comme complète lorsque le temps maximal t_{max} est atteint ou lorsque le nombre maximal d'itérations p_{max} a été réalisé.

Le problème est discrétisé, par rapport à la variable spatiale y , sur l'ensemble des points de la grille $M^p = \{y_u = y_1^p < y_2^p < \dots < y_J^p = y_b\}$.

Notons que le nombre de points du maillage J peut varier d'un pas de temps à un autre avec la méthode de maillage adaptatif. Pour aider à visualiser le maillage, une partie de ce dernier a été représentée sur le schéma de la Figure-A V-1.

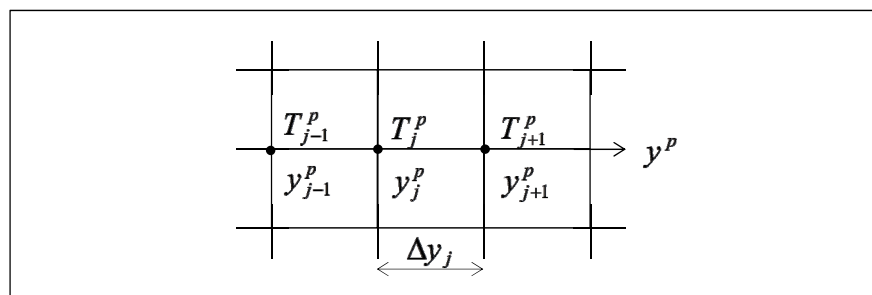


Figure-A V-1 Schéma d'une partie du maillage au temps p

Pour les dérivées du premier ordre, des approximations par différences centrées ou unilatérales sont utilisées. Prenons par exemple, une telle dérivée pour la variable scalaire T au point j de la grille :

- En utilisant un schéma centré du second ordre, on a :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_j \approx \left[\frac{\Delta y_{j-1}}{\Delta y_j (\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} T_{j+1} + \frac{\Delta y_j - \Delta y_{j-1}}{\Delta y_j \Delta y_{j-1}} T_j - \frac{\Delta y_j}{\Delta y_{j-1} (\Delta y_j + \Delta y_{j-1})} T_{j-1} \right] \quad (\text{A V-1})$$

avec : $\Delta y_j = y_{j+1}^p - y_j^p$.

Pour des raisons de commodité, l'exposant p a été volontairement omis dans l'équation (A V-1).

- Les schémas unilatéraux du premier ordre donnent quant à eux les équations suivantes :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_j \approx \frac{T_j - T_{j-1}}{\Delta y_{j-1}} \quad (\text{A V-2})$$

(par différences arrière)

et

$$\left(\frac{\partial T}{\partial y}\right)_j \approx \frac{T_{j+1} - T_j}{\Delta y_j} \quad (\text{A V-3})$$

(par différences avant)

Pour les dérivées du deuxième ordre, un schéma centré du second ordre a été utilisé. Prenons par exemple le terme de conduction de l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right)_j \approx \frac{2}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}} \left[k_{j+1/2} \frac{T_{j+1} - T_j}{\Delta y_j} - k_{j-1/2} \frac{T_j - T_{j-1}}{\Delta y_{j-1}} \right] \quad (\text{A V-4})$$

Les coefficients $k_{j\pm 1/2}$ sont calculés en utilisant les valeurs moyennes des variables dépendantes entre les nœuds. Pour $k_{j-1/2}$, par exemple on a :

$$k_{j-1/2} = k \left(\frac{y_{j-1} + y_j}{2}, t, \frac{\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{u}_j}{2} \right)$$

avec \mathbf{u} le vecteur des inconnues du problème et $j=2, \dots, J$. Rappelons d'ailleurs que la valeur de J peut varier d'un pas de temps à un autre.

Enfin, pour la dérivée temporelle, un schéma d'Euler implicite est utilisé :

$$T_j^{p+1} = T_j^p + (t^{p+1} - t^p) f(t^{p+1}, T^{p+1}) \quad (\text{A V-5})$$

avec la fonction f définie comme suit :

$$\frac{\partial T_j}{\partial t}(t^p) = f(t^p, T_j^p) \quad (\text{A V-6})$$

Notons que les explications présentées dans cette section ont été tirées du manuel de COSILAB.

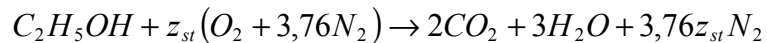
ANNEXE VI

CALCULS POUR PROFIL INITIAL DE BASE

Les profils de base ont été faits pour le cas suivant : à la stœchiométrie; à 300 K et 1 bar.

Calcul des fractions molaires (ou massiques)

Pour calculer l'évolution approximative des fractions molaires (ou massiques) des espèces principales l'équation suivante est considérée :



Cette équation est la réaction d'oxydation de l'éthanol à la stœchiométrie. Les équations de dissociation ne sont pas prises en compte pour simplifier les calculs.

En faisant un bilan atomique, on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} z_{st} = 3 \\ X_{C_2H_5OH} = \frac{1}{1 + 3(1 + 3,76)} = 0,0654 \\ X_{O_2} = \frac{3}{1 + 3(1 + 3,76)} = 0,1963 \\ X_{N_2} = \frac{3 * 3,76}{1 + 3(1 + 3,76)} = 0,7382 \end{array} \right.$$

Ces valeurs sont donc celles à la frontière froide et à l'état initial pour les réactifs. Pour les produits, on a initialement :

$$X_{CO_2} = X_{H_2O} = 0$$

À la frontière chaude, on considère que les réactifs (non inertes) ont été entièrement consommés et qu'il ne reste plus que les produits (dissociations toujours ignorées) :

$$\begin{cases} X_{C_2H_5OH} = X_{O_2} = 0 \\ X_{CO_2} = \frac{2}{2+3+3*3,76} = 0,1229 \\ X_{H_2O} = \frac{3}{2+3+3*3,76} = 0,1843 \end{cases}$$

Dans les manuels de COSILAB, il est aussi conseillé d'indiquer une allure grossière de l'évolution de la fraction molaire (ou massique) de H , O et OH . Une allure gaussienne est notamment recommandée dans les tutoriels du logiciel (Rotexo, 2014).

Pour les fractions molaires (ou massiques), les courbes de la Figure-A VI-1 ont été tracées « à la main ». Leur allure est celle conseillée dans les tutoriels de COSILAB.

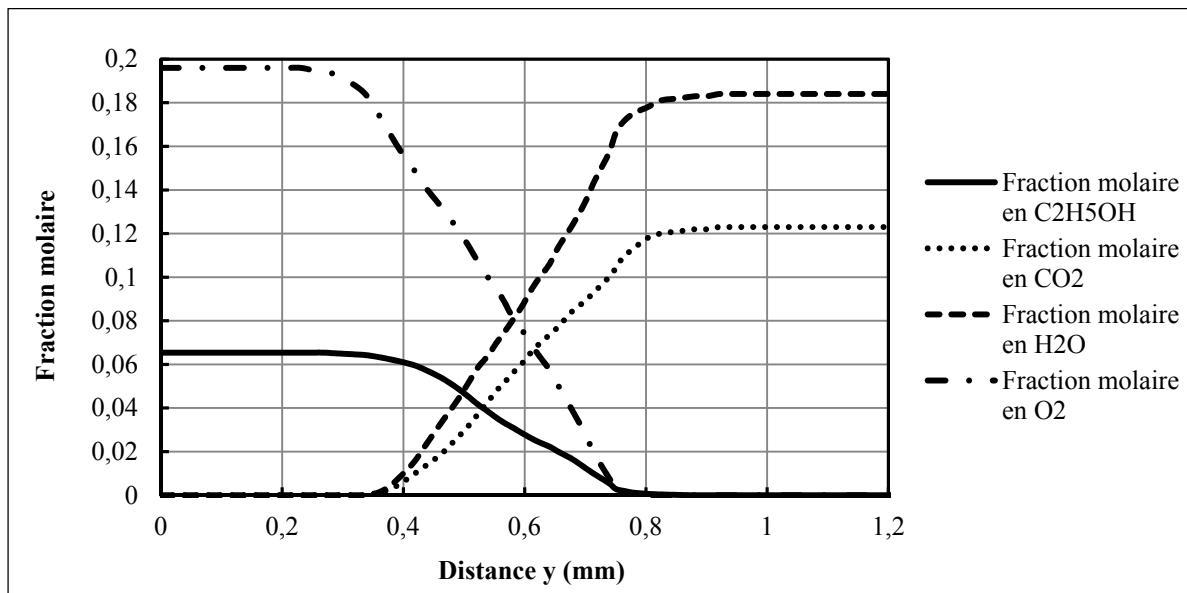


Figure-A VI-1 Allure des profils initiaux pour les fractions molaires des réactifs et produits de l'équation globale considérée pour les calculs

La fraction molaire de l'azote n'est pas représentée sur la Figure-A VI-1. Elle est prise comme constante le long du domaine pour le profil initial.

Calcul du débit massique par unité de surface

En considérant que le mélange gazeux est un gaz parfait, on a :

$$\begin{aligned}
 P &= \rho_g \frac{R}{W_g} T = \rho \frac{R}{\sum_{k=1}^K X_k W_k} \\
 \Rightarrow \rho_g &= \frac{P \sum_{k=1}^K X_k W_k}{RT} \\
 &= \frac{1e^5 * (0,0654 * 46,069 + 0,1963 * 32 + 0,7382 * 28,013) * 10^{-3}}{8,314 * 300} \\
 &= 1,202 \text{ kg/m}^3
 \end{aligned}$$

Or:

$$\dot{M} = \rho_g S_L = 1,202 * 0,42 = 0,505 \text{ kg/(s.m}^2\text{)}$$

La valeur de la vitesse de flamme laminaire utilisée précédemment a été relevée dans la littérature (Broustail, 2012).

En première approximation, le débit massique sera considéré comme constant dans tout le domaine de calcul.

Profil de température

L'allure du profil de température pour la propagation d'une flamme prémélangée est bien connue. Ne connaissant pas la température de flamme, nous avons fixé celle-ci arbitrairement à 2500 K. Lors du tracé du profil de température, il est aussi important de bien réfléchir à la localisation du point d'ancrage du référentiel par rapport à la flamme : on prendra le plus souvent ce point au tiers de la longueur du domaine (cf. Figure 2.1, p.41).

BIBLIOGRAPHIE

- Abramzon, B., et W. A. Sirignano. 1987. « Approximate Theory Of A Single Droplet Vaporization In A Convective Field: Effects Of Variable Properties, Stefan Flow And Transient Liquid Heating ». In *Proceedings of the 1987 ASME-JSME Thermal Engineering Joint Conference*. (Honolulu, HI, USA) Vol. 1, p. 11-18. ASME.
- Abramzon, B., et W. A. Sirignano. 1989. « Droplet vaporization model for spray combustion calculations ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 32, n° 9, p. 1605-1618.
- Ballal, D. R., et A. H. Lefebvre. 1981. « Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel droplets, fuel vapor and air ». In *18th International Symposium on Combustion*. (Waterloo, Aug. 17-22 1980), p. 321-328. Pittsburg: The Combustion Institute.
- Baumgarten, Carsten. 2006. *Mixture Formation in Internal Combustion Engine*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Bougrine, Sabre, Stephane Richard, Andre Nicolle et Denis Veynante. 2011. « Numerical study of laminar flame properties of diluted methane-hydrogen-air flames at high pressure and temperature using detailed chemistry ». *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36, n° 18, p. 12035-12047.
- Broustail, Guillaume. 2012. « *Potentiel de l'utilisation des mélanges hydrocarbures/alcools pour les moteurs à allumage commandé* ». Thèse de doctorat. Montréal, École de technologie supérieure, 262 p.
- Chen, N.-H. , B. Rogg et K.N.C. Bray. 1993. « The Effect of Water on Laminar Flame Structure ». In *Proceedings of the Anglo-German Combustion Symposium*. (Cambridge, England), p. 348-351. The British Section of The Combustion Institute.
- Clarke, A., et G. K. Hargrave. 2009. « Measurements of laminar premixed methane-air flame thickness at ambient conditions ». *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*, vol. 223, n° 8, p. 1969-1973.
- Clift, Roland, J. R. Grace et M. E. Weber. 1978. « Chapter 5 : Spheres at Higher Reynolds Numbers ». In *Bubbles, Drops and Particles*. p. 97-141. New York: Academic Press.
- De Vries, Jaap, William B. Lowry, Zeynep Serinyel, Henry J. Curran et Eric L. Petersen. 2011. « Laminar flame speed measurements of dimethyl ether in air at pressures up to 10 atm ». *Fuel*, vol. 90, n° 1, p. 331-338.

- Egolfopoulos, F. N., D. X. Du et C. K. Law. 1992. « Study on ethanol oxidation kinetics in laminar premixed flames, flow reactors, and shock tubes ». In *Proceedings of the 24th International Symposium On Combustion, July 5, 1992 - July 10, 1992*. (Sydney, Engl), p. 833-841. Coll. « Symposium (International) on Combustion »: Publ by Combustion Inst.
- Erjiang, Hu, Huang Zuohua, Zheng Jianjun, Li Qianqian et He Jiajia. 2009. « Numerical study on laminar burning velocity and NO formation of premixed methane-hydrogen-air flames ». *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 34, n° 15, p. 6545-57.
- Franzelli, B., E. Riber, M. Sanjose et T. Poinso. 2010. « A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames ». *Combustion and Flame*, vol. 157, n° 7, p. 1364-73.
- Gauthier, J. E. D., M. F. Bardon et V. K. Rao. 1996. « General flame-propagation model for fuel droplet, particle and vapour mixtures in air ». *Journal of the Institute of Energy*, vol. 69, n° 479, p. 59-67.
- Greenberg, J. B., I. Silverman et Y. Tambour. 1996. « A new heterogeneous burning velocity formula for the propagation of a laminar flame front through a polydisperse spray of droplets ». *Combustion and Flame*, vol. 104, n° 3, p. 358-368.
- Gulder, Omer L. 1984. « Correlations of laminar combustion data for alternative s.i. engine fuels ». In *West Coast International Meeting and Exposition, August 6, 1984 - August 9, 1984*. (San Diego, CA, United states). Coll. « SAE Technical Papers »: SAE International. < <http://dx.doi.org/10.4271/841000> >.
- Hayashi, S., et S. Kumagai. 1975. « Flame propagation in fuel droplet-vapor-air mixtures ». In *31th International Symposium on Combustion*. (Tokyo, Aug. 25-31 1974), p. 445-452. Pittsburg: The Combustion Institute.
- Hayashi, S., S. Kumagai et T. Sakai. 1976. « Propagation velocity and structure of flames in droplet-vapor-air mixtures ». *Combustion Science and Technology*, vol. 15, n° 5-6, p. 169-177.
- Hirschfelder, Joseph Oakland, Charles F. Curtiss et R. Byron Bird. 1954. « Molecular theory of gases and liquids ». < <http://catalog.hathitrust.org/api/volumes/oclc/534717.html> >.
- Hu, Xianzhong, Qingbo Yu, Junxiang Liu et Nan Sun. 2014. « Investigation of laminar flame speeds of CH₄/O₂/CO₂ mixtures at ordinary pressure and kinetic simulation ». *Energy*, vol. 70, n° 0, p. 626-634.
- Hubbard, G. L., V. E. Denny et A. F. Mills. 1975. « Droplet evaporation: effects of transients and variable properties ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 18, n° 9, p. 1003-8.

- Kuo, Kenneth Kuan-yun. 1986. *Principles of combustion*. New York: J. Wiley, xxiii, 810 p.
- Lafay, Y., B. Renou, G. Cabot et M. Boukhalfa. 2008. « Experimental and numerical investigation of the effect of H₂ enrichment on laminar methane-air flame thickness ». *Combustion and Flame*, vol. 153, n° 4, p. 540-561.
- Lefebvre, Arthur H. 1989. *Atomization and sprays* (1989). New York: Hemisphere, xi, 421 p.
- Liao, S. Y., D. M. Jiang, Z. H. Huang, K. Zeng et Q. Cheng. 2007. « Determination of the laminar burning velocities for mixtures of ethanol and air at elevated temperatures ». *Applied Thermal Engineering*, vol. 27, n° 2-3, p. 374-380.
- Lin, T. H., C. K. Law et S. H. Chun. 1988. « Theory of laminar flame propagation in off-stoichiometric dilute sprays ». *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 31, n° 5, p. 1023-1034.
- Lin, T. H., et Y. Y. Sheu. 1991. « Theory of laminar flame propagation in near-stoichiometric dilute sprays ». *Combustion and Flame*, vol. 84, n° 3-4, p. 333-42.
- Marinov, Nick M. 1999. « Detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation ». *International Journal of Chemical Kinetics*, vol. 31, n° 3, p. 183-220.
- Myers, G. D., et A. H. Lefebvre. 1986. « Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel drops and air ». *Combustion and Flame*, vol. 66, n° 2, p. 193-210.
- Neophytou, A., et E. Mastorakos. 2009. « Simulations of laminar flame propagation in droplet mists ». *Combustion and Flame*, vol. 156, n° 8, p. 1627-1640.
- Neophytou, Alexandre. 2010. « *Spark ignition and flame propagation in sprays* ». Thèse de doctorat. Cambridge, University of Cambridge, 252 p.
- Nomura, Hiroshi, Ikue Kawasumi, Yasushige Ujiie et Jun'ichi Sato. 2007. « Effects of pressure on flame propagation in a premixture containing fine fuel droplets ». In *31th International Symposium on Combustion*. (Heidelberg, Aug. 5-11 2006), p. 2133-2140. Elsevier Ltd. < <http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.036> >.
- Nomura, Hiroshi, Masayoshi Koyama, Hideki Miyamoto, Yasushige Ujiie, Jun'ichi Sato, Michikata Kono et Shin'ichi Yoda. 2000. « Microgravity experiments of flame propagation in ethanol droplet-vapor-air mixture ». In *28th International Symposium on Combustion*. (Edinburgh, July 30 - Aug. 4 2000) Vol. 28, p. 999-1005. The Combustion Institute.

- Rogg, B. 1991. « Adaptive methods in computational fluid dynamics of chemically reacting flows ». In *Second World Congress on Computational Mechanics. WCCM II, 27-31 Aug. 1990.* (Netherlands), 1-3 Vol. 90, p. 659-70. Coll. « Comput. Methods Appl. Mech. Eng. (Netherlands) ». < [http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825\(91\)90177-8](http://dx.doi.org/10.1016/0045-7825(91)90177-8) >.
- Rogg, Bernd 1996. *Modelling and Numerical Simulation of Water Sprays in Laminar Flames*. Bochum: Ruhr-Universität Bochum.
- Rotexo. 2014. *Cosilab*. Logiciel. Bochum (Germany): Rotexo. < www.rotexo.com >.
- Saat, Aminuddin 2010. « Fundamental Studies of Combustion of Droplet and Vapour Mixtures ». Thèse de doctorat. Leeds, The University of Leeds, 182 p.
- Sazhin, S. S., T. Kristyadi, W. A. Abdelghaffar et M. R. Heikal. 2006. « Models for fuel droplet heating and evaporation: Comparative analysis ». *Fuel*, vol. 85, n° 12-13, p. 1613-1630.
- Sirignano, William A. 1983. « Fuel droplet vaporization and spray combustion theory ». *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 9, n° 4, p. 291-322.
- Spalding, Dudley Brian. 1955. *Some Fundamentals of Combustion*. Pp. x. 250. Butterworths Scientific Publications: London.
- Statpoint Technologies, Inc. 2013. *STATGRAPHICS Centurion XVI*.(Version 16.2.04).
- Turns, Stephen R. 2000. *An introduction to combustion : concepts and applications*, 2nd ed.. Boston: Boston : McGraw-Hill, xxiii, 676 p. p.
- Wu, Hao, Erjiang Hu, Huibin Yu, Qianqian Li, Zihang Zhang, Yizhen Chen et Zuohua Huang. 2014. « Experimental and numerical study on the laminar flame speed of n-butane/dimethyl ether-air mixtures ». *Energy and Fuels*, vol. 28, n° 5, p. 3412-3419.
- Yu, Huibin, Erjiang Hu, Yu Cheng, Xinyi Zhang et Zuohua Huang. 2014. « Experimental and numerical study of laminar premixed dimethyl ether/methane-air flame ». *Fuel*, vol. 136, p. 37-45.
- Yuen, M. C., et L. W. Chen. 1976. « On Drag Of Evaporating Liquid Droplets ». *Combustion Science and Technology*, vol. 14, n° 4 -5-6, p. 147-154.
- Zhu, M., et B. Rogg. 1996. « Modelling and simulation of sprays in laminar flames ». *Meccanica*, vol. 31, n° 2, p. 177-93.