

Étude numérique des instabilités de flammes prémélangées en régime laminaire

par

Lucas LE CORVEC

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION DE LA MAÎTRISE
AVEC MÉMOIRE EN GÉNIE AÉROSPATIAL
M.Sc.A.

MONTRÉAL, LE 11 SEPTEMBRE 2017

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Lucas Le Corvec, 2017



Cette licence Creative Commons signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette oeuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'oeuvre n'ait pas été modifié.

PRÉSENTATION DU JURY

CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ

PAR UN JURY COMPOSÉ DE:

M. Patrice Seers, Directeur de Mémoire
Département de génie mécanique

M. François Morency, Président du Jury
Département de génie mécanique

M. Stéphane Hallé, membre du jury
Département de génie mécanique

IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC

LE 31 AOÛT 2017

À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de recherche M. Patrice Seers, tant pour son expertise que pour son soutien dans les moments difficiles, mais également pour m'avoir proposé un sujet qui m'a plu.

Je tiens également à remercier particulièrement Sitraka Razanamparany, Jonathan Brulatout, Denis Lapalme ainsi que Mohamed Chouak pour leur aide précieuse ainsi que leurs conseils avisés qui m'ont grandement aidé pour ce mémoire. Mes remerciements vont également à tous les membres du laboratoire de ThermoFluide pour le Transport pour leur bonne humeur et leur contribution à l'atmosphère si chaleureuse qui règne dans ce laboratoire.

Je n'oublie pas non plus mes amis Nordine, Kevin, Julien et Thomas pour leur aide et leur soutien dans cette épreuve.

Enfin, je remercie du fond du coeur ma famille et mes amis outre-Atlantique qui ont toujours cru en moi et qui m'ont toujours encouragé et aller de l'avant.

ÉTUDE NUMÉRIQUE DES INSTABILITÉS DE FLAMMES PRÉMÉLANGÉES EN RÉGIME LAMINAIRE

Lucas LE CORVEC

RÉSUMÉ

Les flammes laminaires prémélangées hydrogène/air sont susceptibles de développer des instabilités dues à des effets hydrodynamiques (connues sous le nom d'instabilités de Darrieus-Landau) et dues à des effets thermodiffusifs. Le premier est dû au changement de masse volumique du fluide tandis que l'autre est dû aux propriétés thermodiffusives des espèces. L'instabilité de la flamme se traduit par l'apparition de zones de combustion localisées que l'on appelle cellules qui se caractérisent par leur comportement auto-accélération.

Cette étude a été réalisée afin d'étudier l'influence de plusieurs paramètres sur le phénomène de cellularité : la cinétique chimique, la loi de mélange, la pression et enfin la condition initiale de perturbation. Pour ce faire, un modèle numérique a été mis en place : les équations de Navier-Stokes sont résolues en régime compressible, laminaire et instationnaire via le logiciel STAR-CCM+. Le domaine de simulation utilisé est un carré 2D de 160 000 cellules, le schéma de discrétisation temporelle utilisé est un schéma implicite de second ordre alors que le schéma de discrétisation spatiale est un schéma explicite de second ordre.

Dans un premier temps, quatre cinétiques chimiques furent testées. Malgré un comportement global du front de flamme similaire pour chaque cinétique, des différences au niveau du nombre de cellules et de leur taille demeurent, probablement dues aux mécanismes de réaction associés à chaque cinétique. L'impact de la loi de mélange sur la cellularité fut étudié au travers de deux lois de mélange : une loi de mélange basée sur la fraction massique et la loi de mélange Mathur-Saxena, basée sur la fraction molaire. Une forte influence de ce paramètre fut observée, du fait que la conductivité thermique du mélange était modifiée et donc le nombre de Lewis également. L'impact de l'augmentation de pression se traduit par une croissance du nombre total de cellules avec l'augmentation de pression, ainsi qu'un front de flamme de plus en plus chaotique et dentelé. Les paramètres de la perturbation initiale furent étudiés dans un dernier temps (amplitudes de perturbation et fréquence d'oscillation) et indiquèrent un fort impact de ces paramètres sur la cellularité, avec notamment une modification importante du front de flamme et de la taille des cellules.

Cette étude a permis d'étudier l'influence de plusieurs paramètres sur le phénomène de cellularité, en utilisant un modèle simple d'ordre 2.

Mots clés: flamme prémélangée, H₂/air, cellules, laminaire, instabilités

NUMERICAL STUDY OF PREMIXED LAMINAR FLAMES INSTABILITIES

Lucas LE CORVEC

ABSTRACT

Hydrogen-air premixed laminar flames are likely to develop instabilities due to hydrodynamic effects (known as Darrieus-Landau instability) or thermodiffusive effects. The former is due to the change in fluid density through the flame while the latter is associated to the thermodiffusive properties of the species. The flame instability is recognized by the appearance of local combustion areas known as cells, characterized by their self-accelerating behavior.

The purpose of this Masters' thesis was to study the influence of several parameters on the phenomenon of cellularity : the kinetic mechanism, the mixing law, the pressure and finally the initial condition of perturbation. In order to realize this study, a numerical model was set up : compressible, laminar and unsteady Navier-Stokes equations are solved on a 2D square computational domain having 160 000 cells using STAR-CCM+ and using a 2nd-order explicit spatiale discretization scheme and a 2nd-order temporal implicit discretization scheme.

Firstly, four kinetic mechanisms were tested. Although the global behaviour of the flame front of each kinetic mechanism was similar, there were still differences on the total number of cells but also on their sizes, probably due to the kinetic mechanisms associated with each kinetic. The influence of the mixing law was also studied by using two different mixing laws : a mixing law based on mass fraction and the mixing law of Mathur-Saxena, based on molar fraction. It resulted in a substantial impact of this parameter on the cellularity because of the modification of the mixture thermal conductivity and so the modification of the Lewis number. The influence of pressure increasing resulted in more cells but also in a significant modification of the flame front as it became more chaotic and serrated. At last, the parameters of the initial perturbation were studied (amplitudes of perturbation and oscillation frequency) and the results indicated that it impacts both the flame front and the cells (size and number).

This study enabled to quantify the influence of several parameters on the cellularity phenomenon, by using a two-order simple model.

Keywords: premixed flame, H₂/air, laminar, cells, instabilities

TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE	3
1.1 Les bases de la combustion	3
1.2 La flamme unidimensionnelle	5
1.3 Instabilités de flamme laminaire prémélangée	8
1.3.1 Instabilité thermodiffusive	9
1.3.2 Instabilité hydrodynamique	10
1.3.3 Instabilité de Rayleigh - Taylor	12
1.4 Théorie et travaux actuels	13
1.4.1 Théorie générale des instabilités	13
1.4.2 Études numériques	16
1.4.3 Effet du nombre de Lewis	17
1.4.4 Effet de la pression	19
1.4.5 Effet de la turbulence	20
1.4.6 Conditions initiales et taille du domaine	21
1.4.7 Synthèse du chapitre et définition des objectifs	22
CHAPITRE 2 MODÈLE NUMÉRIQUE	23
2.1 Résolution numérique des équations fondamentales	23
2.1.1 Équations de Navier-Stokes pour un écoulement compressible	23
2.1.1.1 Méthode des volumes finis	24
2.1.2 Discrétisation des équations	25
2.1.2.1 Discrétisation temporelle	26
2.1.2.2 Terme source	27
2.1.2.3 Terme de convection	27
2.1.2.4 Terme de diffusion	28
2.1.3 Transport des espèces	29
2.2 Domaine de simulation	30
2.3 Construction du modèle numérique	30
2.3.1 Choix du schéma de discrétisation temporelle	31
2.3.2 Choix du schéma de discrétisation spatiale	31
2.3.3 Choix des modèles chimiques	32
2.3.4 Conditions initiales et conditions aux limites	35
2.3.5 Étude de maillage	38
2.3.6 Synthèse du modèle numérique	40
CHAPITRE 3 INFLUENCE DE LA CINÉTIQUE CHIMIQUE ET DE LA LOI DE MÉLANGE	43
3.1 Influence de la cinétique chimique	43

3.1.1	Cinétique chimique de Sandia	44
3.1.2	Cinétique chimique de Davis	46
3.1.3	Cinétique chimique de San Diego	48
3.1.4	Cinétique chimique de LLNL	49
3.2	Comparaison des cinétiques chimiques	51
3.2.1	Nombre de cellules	51
3.2.2	Taux de déformation	52
3.2.3	Dégagement de chaleur et fraction molaire de OH	54
3.3	Influence de la loi de mélange	56
3.3.1	Test de la nouvelle loi de mélange sur Davis	57
3.3.2	Test de la nouvelle loi de mélange sur San Diego	59
3.3.2.1	Conditions de Dirichlet	60
3.3.2.2	Conditions de Neumann	61
3.4	Conclusion du chapitre	63
CHAPITRE 4 INFLUENCE DE LA PRESSION		65
4.1	Contexte numérique	65
4.2	1 atmosphère	66
4.3	2.5 atmosphères	68
4.4	5 atmosphères	70
4.5	Comparaison des différents cas de pression	73
4.5.1	Nombre de cellules	73
4.5.2	Taux de déformation	74
4.5.3	Taux de dégagement de chaleur	75
4.6	Conclusion du chapitre	77
CHAPITRE 5 INFLUENCE DE LA PERTURBATION INITIALE		79
5.1	Contexte numérique	79
5.2	Amplitude divisée par deux	80
5.3	Période multipliée par deux	82
5.4	Amplitude divisée par deux et période multipliée par deux	83
5.5	Comparaison globale	84
5.5.1	Nombre de cellules	85
5.5.2	Taux de déformation	86
5.5.3	Taux de dégagement de chaleur	87
5.6	Conclusion du chapitre	89
CONCLUSION		91
ANNEXE I	INFORMATIONS COMPLÉMENTAIRES SUR LE MODÈLE DE CHIMIE	95
ANNEXE II	MÉCANISMES DE RÉACTION UTILISÉS	99

ANNEXE III	RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES	109
BIBLIOGRAPHIE		113

LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 2.1	Vitesse de déplacement du front de flamme en fonction du maillage 40
Tableau 2.2	Récapitulatif des conditions de simulation du chapitre 3 41
Tableau 3.1	Récapitulatif des conditions de simulation de la section 3.1 du chapitre 3..... 44
Tableau 3.2	Récapitulatif des conditions de simulation de la section 3.3 du chapitre 3..... 57
Tableau 3.3	Conductivité thermique du mélange frais pour Davis à $t=7.5$ ms ("Davis 075") et à $t=15$ ms ("Davis 15") en fonction de la loi de mélange 59
Tableau 3.4	Viscosité dynamique du mélange frais pour Davis à $t=7.5$ ms ("Davis 075") et à $t=15$ ms ("Davis 15") en fonction de la loi de mélange 59
Tableau 3.5	Conductivité thermique du mélange frais pour San Diego à $t=7.5$ ms ("San Diego 075") et à $t=15$ ms ("San Diego 15") en fonction de la loi de mélange 61
Tableau 3.6	Viscosité dynamique du mélange frais pour San Diego à $t=7.5$ ms ("San Diego 075") et à $t=15$ ms ("San Diego 15") en fonction de la loi de mélange..... 61
Tableau 4.1	Vitesse de flamme laminaire, épaisseur de flamme laminaire et taux de dégagement de chaleur volumique laminaire en fonction de la pression 66

LISTE DES FIGURES

	Page
Figure 1.1 Structure d'une flamme laminaire prémélangée. Tirée de : Turns (1996)	4
Figure 1.2 Structure d'une flamme unidimensionnelle se propageant librement selon différents aspects : a) aspect hydrodynamique b) aspect de transport et c) aspect réactif. Tirée de : Law (2000).....	6
Figure 1.3 Flamme laminaire prémélangée hydrogène/air possédant un nombre de Lewis inférieur à 1 ($Le < 1$). Tirée de : Matalon (2011).....	10
Figure 1.4 Simulation numérique d'une flamme laminaire pulsative. Tirée de : Sánchez (2017).....	10
Figure 1.5 Instabilité thermodiffusive. Tirée de : Law (2000)	11
Figure 1.6 Instabilité hydrodynamique. Tirée de : Law (2000)	12
Figure 1.7 Simulation numérique d'une instabilité de Rayleigh-Taylor. Tirée de : Štrubelj (2008)	13
Figure 2.1 Initialisation du domaine	36
Figure 2.2 Évolution de la température au cours du temps pour le maillage 284×284 (images du haut) et le maillage 400×400 (images du bas)	39
Figure 2.3 Évolution de la température au cours du temps pour le maillage 400×400 (images du haut) et le maillage 566×566 (images du bas)	39
Figure 3.1 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Sandia	45
Figure 3.2 Superposition des lignes de courant et de la fraction molaire de OH pour la cinétique chimique de Sandia à $t=12.5$ ms	46
Figure 3.3 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Davis	47
Figure 3.4 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego	48
Figure 3.5 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de LLNL.....	50

Figure 3.6	Nombre de cellules au cours du temps pour chaque cinétique chimique.....	52
Figure 3.7	Taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cinétique chimique.....	53
Figure 3.8	Taux de dégagement de chaleur maximal au cours du temps pour chaque cinétique chimique	55
Figure 3.9	Fraction molaire maximale de OH au cours du temps pour chaque cinétique chimique.....	56
Figure 3.10	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Davis avec la loi de mélange Mathur-Saxena	58
Figure 3.11	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego avec la loi de mélange Mathur-Saxena	60
Figure 3.12	Évolution de la fraction molaire de OH entre 12.5 et 20 ms pour la cinétique chimique de San Diego avec la condition de sortie de Dirichlet (images du haut) et de Neumann (images du bas)	62
Figure 4.1	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 1 atmosphère.....	67
Figure 4.2	Évolution de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 1 atmosphère.....	68
Figure 4.3	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 2.5 atmosphères.....	69
Figure 4.4	Évolution de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 2.5 atmosphères	70
Figure 4.5	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 5 atmosphères.....	72
Figure 4.6	Évolution de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 5 atmosphères	72
Figure 4.7	Nombre de cellules au cours du temps pour chaque cas de pression	74
Figure 4.8	Taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cas de pression	75

Figure 4.9	Taux de dégagement de chaleur maximal adimensionnalisé au cours du temps pour chaque cas de pression	77
Figure 5.1	Conditions de perturbations initiales	80
Figure 5.2	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego B25	81
Figure 5.3	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego DO	82
Figure 5.4	Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego DOB25	84
Figure 5.5	Nombre de cellules au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale	86
Figure 5.6	Taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale	87
Figure 5.7	Taux de dégagement de chaleur maximal au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale	88

LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

Ar	Argon
C ₂ H ₆	Éthane
CO	Monoxyde de carbone
CO ₂	Dioxyde de carbone
H	Hydrogène
H ₂	Dihydrogène
H ₂ O	Eau
H ₂ O ₂	Péroxyde d'hydrogène
He	Hélium
HO ₂	Radical hydroperoxyde
O	Oxygène
O ₂	Dioxygène
OH	Radical hydroxyle
N ₂	Diazote

LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

Symbole	Description	Unités de mesure
ρ	Masse volumique	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$
t	Temps	s
u	Vitesse	$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$
p	Pression statique	Pa
A	Surface	m^2
τ_{ij}	Tenseur des contraintes de cisaillement	Pa
e	Énergie totale	J
\dot{q}	Flux de chaleur	W
Δt	Pas de temps	s
Δx	Pas spatial	m
\dot{m}	Flux massique	$\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
Y	Fraction massique	-
F	Flux de diffusion des espèces	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
ω_i	Terme source de l'espèce i	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
h	Enthalpie	J
D	Diffusivité moléculaire	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
$D_{i,j}$	Coefficient de diffusion binaire du couple d'espèce i et j	$\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$
X	Fraction molaire	-
M	Masse molaire	$\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$
$\sigma_{i,m}$	Diamètre de collision pour la paire d'espèce i et m	Å

Symbole	Description	Unités de mesure
$\Omega(T^*)$	Opérateur de collision	-
T^*	Température réduite	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
T	Température	K
k_b	Constante de Boltzmann	$\text{m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
k	Conductivité thermique	$\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
S_L	Vitesse de flamme laminaire	$\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
δ_L	Épaisseur de flamme laminaire	m
$\varepsilon_{i,m}$	Énergie caractéristique de Lennard-Jones pour la paire d'espèces i et m	$\text{J} \cdot \text{kmol}^{-1}$
μ	Viscosité dynamique	$\text{Pa} \cdot \text{s}$
C_p	Chaleur spécifique	$\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
R_u	Constante universelle des gaz parfaits	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
α	Diffusivité thermique	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
ε	Taux de déformation	s^{-1}
R_j	Taux de réaction de l'espèce j	$\text{kmol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$
HRR	Taux de dégagement de chaleur volumique adimensionnalisé	-
$H_{f,0}$	Enthalpie standard de formation	J
ω	Pulsation	s^{-1}
λ	Longueur d'onde	m

INTRODUCTION

Les problèmes d'ordre environnementaux étant de plus en plus présent au sein de notre planète et dans notre société, il devient aujourd'hui obligatoire de chercher des solutions afin d'y remédier. Malgré de réelles avancées technologiques durant le dernier siècle, nos modes de transport restent cependant ancrés à la combustion d'hydrocarbures, induisant une pollution continue. La connaissance de plus en plus poussée vis-à-vis des combustibles alternatifs (bio-diesel, éthanol, colza, etc.) ouvre néanmoins de nouvelles portes à la réduction des émissions polluantes. Une des alternatives proposée est la combustion d'hydrogène en mélange pauvre : en effet, la combustion d'hydrogène à basse richesse permet une diminution de la production des oxydes d'azote (NOx). En 1806, Francois Isaac de Rivaz fut le premier à créer un moteur à combustion interne fonctionnant à l'hydrogène. Puis, en 1974, Paul Dieges déposa un brevet sur la modification des moteurs à combustion interne alimentés par de l'essence afin qu'ils puissent fonctionner avec de l'hydrogène (Dieges (1974)). De réels efforts sont fournis afin de développer ce type de moteurs, notamment au Japon où l'université de Tokyo travaille depuis plusieurs décennies sur ce sujet, ce qui a permis récemment de développer des bus et des camions (Yamane (2009)) fonctionnant grâce aux moteurs HICEV ("Hydrogen Internal combustion Engine Vehicle") ou encore parmi les grands constructeurs automobiles tels que le groupe allemand BMW avec son prototype, la "BMW Hydrogen 7" (BMW (2017)). Cependant, malgré de nombreux travaux théoriques, expérimentaux et numériques, des efforts sont encore à fournir afin de comprendre et caractériser ce genre de combustion : en effet, la combustion de l'hydrogène en milieu pauvre est sujette au développement d'instabilités qui se caractérisent notamment par une transformation du front de flamme : au lieu d'être plan et droit, celui-ci se courbe et fait naître de petites régions de flamme isolées (des "cellules"), c'est ce que l'on appelle le phénomène de cellularité. Il semble alors intéressant de caractériser et quantifier l'apparition de ce phénomène afin d'être en mesure de prédire son comportement au sein des machines thermiques.

C'est dans cette optique que les objectifs de ce mémoire se définissent : continuer les travaux de compréhension et de caractérisation de ces instabilités de flamme via l'étude de l'influence de divers paramètres sur ce phénomène. Pour cela, celui-ci sera structuré de la manière suivante : le premier chapitre sera dédié à la revue de littérature, en rappellement brièvement les bases de la combustion, le détail des instabilités évoquées précédemment ainsi que les travaux actuels traitant de ce phénomène. Le second chapitre portera sur la présentation du modèle mathématique et numérique utilisé. Le troisième chapitre sera centré sur l'impact de la cinétique chimique ainsi que la loi de mélange utilisée sur l'apparition et le développement des cellules. Les quatrièmes et cinquièmes chapitres porteront respectivement sur l'impact de la pression et de la perturbation initiale sur la cellularité.

CHAPITRE 1

REVUE DE LITTÉRATURE

1.1 Les bases de la combustion

La combustion est une réaction chimique exothermique de type oxydant (le comburant, généralement le dioxygène) - réducteur (le combustible), se produisant à haute température afin de briser les liens entre les molécules mises en jeu et généralement consistant en une multitude de réactions chimiques (Turns (1996), Glassman *et al.* (2014)). Une combustion donne naissance à une flamme, c'est-à-dire une zone de combustion localisée se propageant d'elle-même à vitesse subsonique (déflagration) et qui peut être visible ou non. Les flammes se divisent en deux catégories (les flammes partiellement prémélangées ne seront pas considérées ici, du fait qu'elles peuvent se comporter plutôt comme des flammes de diffusion ou des flammes prémélangées selon si le comburant et le combustible sont bien mélangés ou non) :

- Premièrement, la flamme de diffusion, ou flamme non-mélangée, se caractérise par le fait que le comburant et le combustible sont séparés. Elle est dominée par la formation du mélange des réactants et de l'oxydant, et les réactions chimiques prennent place à l'interface entre le carburant et l'oxydant. Comme flammes de diffusion, il est possible de citer la combustion du bois ou encore les moteurs-fusée.
- Deuxièmement, la flamme prémélangée, où le comburant et le combustible forme une phase homogène. Par exemple, la flamme à la sortie d'un chalumeau est une flamme prémélangée ou encore les moteurs à allumage commandé qui utilisent une flamme prémélangée.

De plus, puisque les flammes impliquent des flux de mélange elles peuvent être soit turbulentes si ces flux sont de vitesse élevée, soit laminaires. L'aspect de turbulence ne sera pas considéré ici mais peut être trouvé dans la littérature (Turns (1996)).

La Figure 1.1 représente la structure d'une flamme laminaire prémélangée (évolution de la fraction massique des réactifs, de la température et du dégagement de chaleur en fonction de la position), qui se décompose en deux zones : une zone de préchauffage et une zone de réaction.

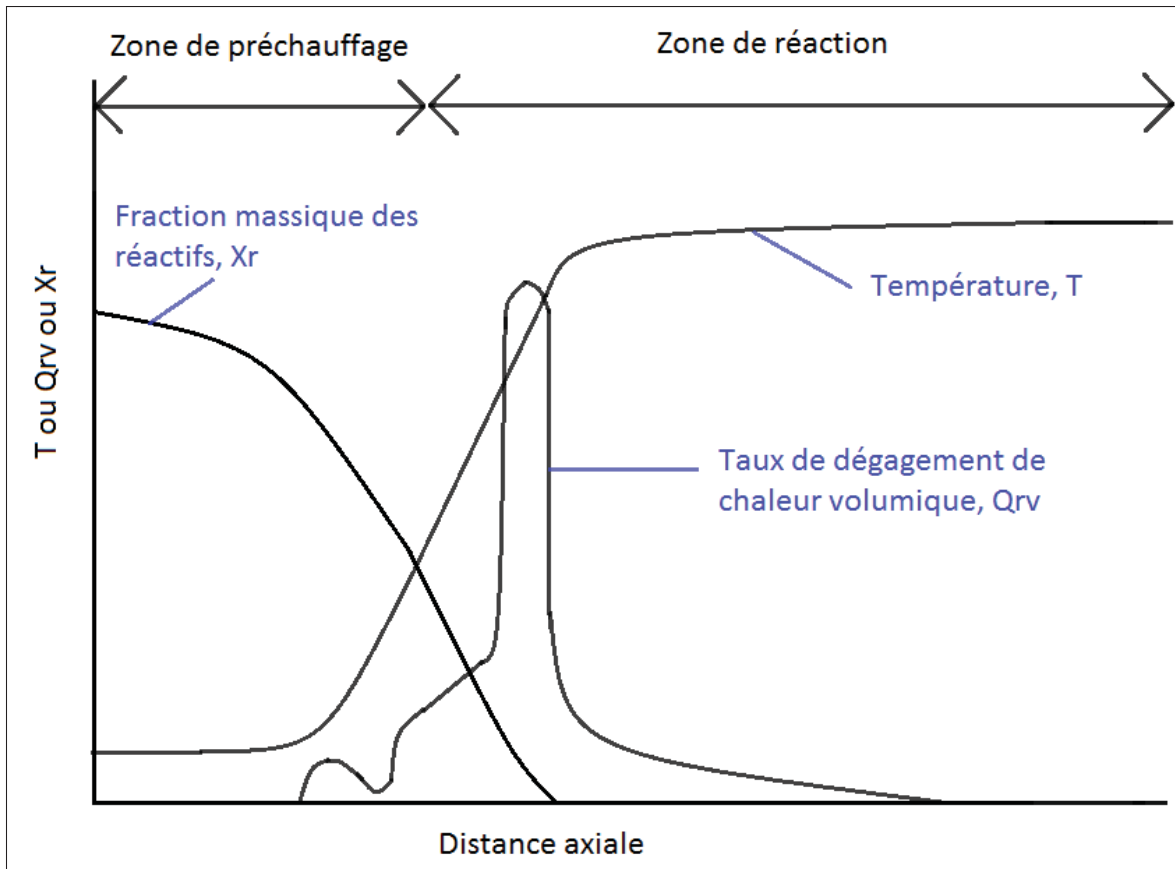


Figure 1.1 Structure d'une flamme laminaire prémélangée.
Tirée de : Turns (1996)

- La zone de préchauffage est la zone contenant les réactifs et où la température va augmenter jusqu'à atteindre la température d'inflammation du mélange, puis, une fois cette température atteinte, la combustion est déclenchée : la température va alors continuer de croître jusqu'à atteindre la température de flamme.
- La zone de réaction est le siège des réactions chimiques et se divise en deux parties. Premièrement, la zone de réactions rapides (très mince) qui se caractérisent par la destruction des molécules de carburant et la création d'espèces intermédiaires (où les réactions bimoléculaires de type $A + B \rightarrow \text{Produit}(s)$ dominent). Pour les flammes d'hydrocarbures les produits majoritaires sont H_2O et CO_2 alors que pour l'hydrogène il s'agit majoritairement d' H_2O . Cette zone se caractérise également par des gradients de température et de concentration très élevés et qui ont pour conséquence que la flamme se propage seule via

la diffusion de chaleur et de radicaux dans la zone de préchauffage. Enfin, une des dernières caractéristiques de cette zone est sa couleur, qui, pour les flammes d'hydrocarbures est bleue en présence d'un excès d'air (CH excité), bleue-verte lorsque le mélange est légèrement riche ou encore jaune-blanc lorsque très riche (suie) (Turns (1996)). En réalité, le monoxyde d'hydrogène (OH) et la réaction $CO + O \rightarrow CO_2$ contribuent à toute luminosité de la flamme. La zone de réaction lente, quant à elle, est caractérisée par une domination des réactions de recombinaisons (les réactions à trois espèces sont normalement lentes) ainsi que son épaisseur qui peut atteindre quelques millimètres à pression atmosphérique.

Les bases de la combustion et plus particulièrement le principe de flamme prémélangée ayant été rappelés, la flamme unidimensionnelle va être abordée afin de faciliter par la suite la compréhension des phénomènes d'instabilités.

1.2 La flamme unidimensionnelle

Afin de faciliter la compréhension de ce qui va suivre, nous allons introduire le nombre de Lewis. Le nombre de Lewis est un nombre adimensionnel défini comme le rapport entre la diffusivité thermique et la diffusivité massique et est utilisé afin de quantifier l'influence du transfert de chaleur et de masse au sein d'un écoulement de fluide. Le nombre de Lewis est défini de la manière suivante (Renner (2007)) :

$$Le = \frac{\alpha}{D} = \frac{k}{\rho D_{im} C_p} \quad (1.1)$$

Avec α la diffusivité thermique du mélange, D la diffusivité de masse du mélange, k la conductivité thermique du mélange, D_{im} est le coefficient de diffusion moyen du mélange (dans le cadre d'un écoulement contenant plusieurs espèces chimiques) et C_p est la chaleur spécifique à pression constante du mélange.

Considérons une flamme unidimensionnelle se propageant librement en régime laminaire comme présentée sur la Figure 1.2.a). Il est d'abord nécessaire de différencier la partie des gaz frais se trouvant à gauche du front de flamme, indiquée via l'indice u (pour "unburned") et la partie des

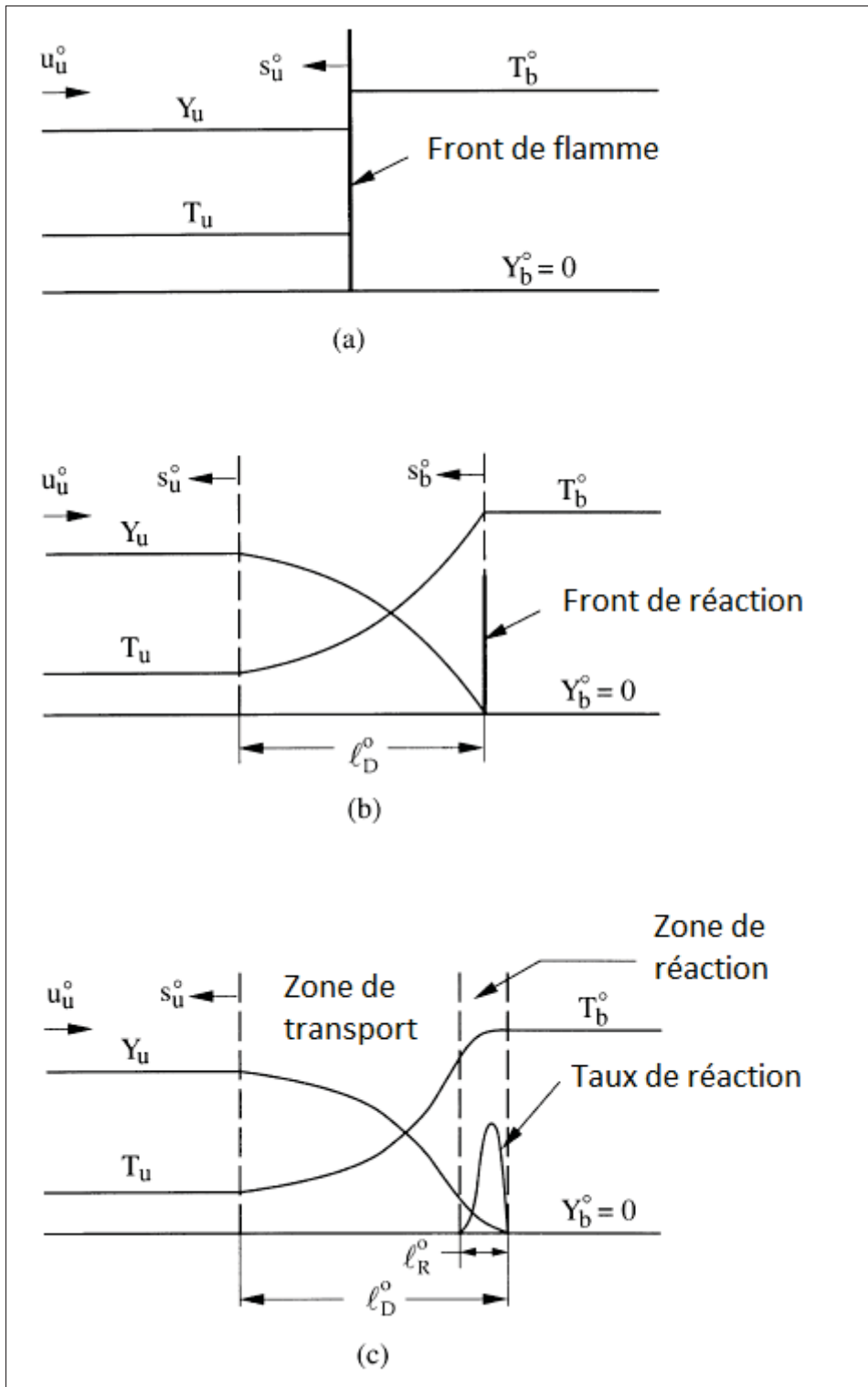


Figure 1.2 Structure d'une flamme unidimensionnelle se propageant librement selon différents aspects : a) aspect hydrodynamique b) aspect de transport et c) aspect réactif.
Tirée de : Law (2000)

gaz brûlés, indiquée via l'indice b (pour "burnt"), se trouvant à droite du front de flamme. On ne considère ici qu'une réaction simple de type *Réactif* \rightarrow *Produit*, signalée par la présence de l'indice 0. T représentant la température et Y la fraction massique.

- Considérons alors un mélange air-carburant arrivant à une vitesse u et notons s la vitesse de la flamme : si $u > s$ alors le front de flamme va reculer (vers la droite du domaine de la Figure 1.2), si $u = s$ alors le front de flamme va rester stationnaire et si $u < s$ alors le front de flamme va avancer. Ce front de flamme sépare deux états thermodynamiques en équilibre : l'état imbrulé et l'état brûlé, liés par les lois de conservation de la masse et de l'énergie (Figure 1.2.a).
- Considérons maintenant l'aspect de transport de la flamme, en amont du front de flamme se trouve une zone de préchauffage de longueur l_D^o comme indiqué sur la Figure 1.2.b). Cette zone, dominée par la diffusion thermique et massique, réchauffe le mélange jusqu'à atteindre la température des gaz brûlés T_b , entraînant au fur et à mesure la combustion du réactif et créant un gradient de concentration et de température. Or, le nombre de Lewis étant défini comme le rapport de la diffusivité thermique sur la diffusivité massique, un nombre de Lewis égal à 1 implique que la concentration et la température dans cette zone doivent se diffuser de manière équivalente, ce qui ne sera pas le cas pour un nombre de Lewis différent de 1.
- Enfin, considérons l'aspect réactif de la flamme (Figure 1.2.c)) et notamment la zone de réaction, de longueur l_R^o . Le taux de réaction est une fonction avec un pic marqué, composée d'une partie qui croît rapidement due à l'activation de la réaction, puis une partie qui décroît rapidement à cause de l'épuisement du réactif. Puisque cette zone est bien plus petite que la zone de préchauffage, il est attendu que les phénomènes de diffusion (qui sont des phénomènes de transport de second ordre) dominent les phénomènes de convection (qui eux sont du premier ordre).

Finalement, nous avons vu que la flamme unidimensionnelle se caractérise par deux zones majeures : la zone de préchauffage de longueur l_D^o où la diffusion et la convection dominent et s'autobalancent, et la zone de réaction de longueur l_R^o où la réaction et la diffusion dominent

et s'autobalancent. De plus, puisque $l_D^o \gg l_R^o$ alors l'épaisseur de flamme peut être considérée telle qu'elle égale à l_D^o .

Les caractéristiques de la flamme laminaire prémélangée unidimensionnelle se propageant librement ayant été rappelées, ceci va nous permettre d'introduire les différentes instabilités des flammes prémélangées, leurs origines et leurs conséquences sur la flamme.

1.3 Instabilités de flamme laminaire prémélangée

Contrairement aux flammes laminaires prémélangées unidimensionnelles, les flammes laminaires prémélangées en deux ou trois dimensions apparaissent souvent sous la forme non pas plane, mais plutôt plissée. Ce changement de forme peut être attribué à plusieurs facteurs : la non-uniformité du fluide en amont de la flamme, la non-homogénéité de la température ou de la composition au sein du mélange ou encore une instabilité intrinsèque à la flamme. Ce dernier facteur a fait l'objet de nombreuses études (Darrieus (1938), Landau (1944), Linan (1993)) et peut être causé par trois différents facteurs : les effets hydrodynamiques, les effets thermodiffusifs et l'instabilité de Rayleigh-Taylor.

Avant de définir la première instabilité, l'instabilité thermodiffusive, il est important de définir ce qu'est une flamme equidiffusive ou non-equidiffusive. Les flammes equidiffusives sont des flammes possédant un nombre de Lewis égal à l'unité ($Le = 1$) et les flammes non-equidiffusives sont des flammes possédant un nombre de Lewis différent de l'unité ($Le \neq 1$). De plus, au sein des flammes non-equidiffusives on peut distinguer les flammes dont le nombre de Lewis est supérieur à 1 ($Le > 1$) et celles dont le nombre de Lewis est inférieur à 1 ($Le < 1$). Ce mémoire porte sur les flammes non-equidiffusives puisque comme les travaux de Markstein (1964) l'ont démontré dans les années 60, l'étirement induit par la courbure de la flamme n'a que très peu d'influence pour une flamme equidiffusive et le contraire pour une flamme non-equidiffusive, et donc une flamme possédant un nombre de Lewis de l'unité sera stable. L'equidiffusivité ou non d'une flamme ayant été proprement définie, nous allons pouvoir définir la première instabilité : l'instabilité thermodiffusive.

1.3.1 Instabilité thermodiffusive

L'instabilité thermodiffusive est directement liée au nombre de Lewis : en effet, pour une flamme non-equidiffusive, la diffusion thermique et la diffusion massique ne se compensent pas et peuvent transformer une flamme initialement plane en une flamme pulsative (Figure 1.4) ou encore faire apparaître de la cellularité (division de la flamme homogène en plusieurs zones de combustion localisées que l'on appelle cellules, Figure 1.3) au sein de la flamme. Afin d'expliquer le phénomène donnant naissance à l'apparition de la cellularité, considérons une flamme perturbée comme sur la Figure 1.5. La flamme n'étant pas plane mais légèrement incurvée, la diffusion massique et thermique entre la zone de réaction et la zone de préchauffage peut avoir lieu dans la direction de l'écoulement et dans la direction perpendiculaire à celui-ci. Dans le cas d'une flamme dont le nombre de Lewis est inférieur à 1 ($Le < 1$), le flux de chaleur partant du front de flamme est plus faible que la quantité de masse qui y arrive, permettant une accumulation locale de quantité de chaleur et de réactifs. Ceci se traduit par une augmentation de la vitesse de combustion au sein des segments convexes (par rapport au mélange frais) et une diminution de celle-ci au sein des segments concaves (par rapport au mélange frais) ce qui a pour conséquence de faire avancer les segments convexes (par rapport au mélange frais) du front de flamme vers les gaz frais et de faire reculer les segments concaves (par rapport au mélange frais) vers les gaz brûlés : ainsi, nous obtenons une flamme de plus en plus courbée et qui peut parfois se briser localement. À l'inverse, dans le cas d'une flamme possédant un nombre de Lewis supérieur à 1 ($Le > 1$), la combustion est intensifiée au niveau des segments concaves et diminuée au niveau des segments convexes : ce qui entraîne un lissage de la flamme. Par conséquent, une flamme laminaire prémélangée possédant un nombre de Lewis supérieur à 1 se stabilisera forcément (par un lissage du front de flamme) alors qu'une flamme laminaire prémélangée possédant un nombre de Lewis inférieur à 1 aura tendance à se plisser et donc devenir plus instable. L'instabilité thermodiffusive ayant été définie et expliquée, nous allons passer à la deuxième instabilité pouvant causer une instabilité intrinsèque de la flamme : l'instabilité hydrodynamique.

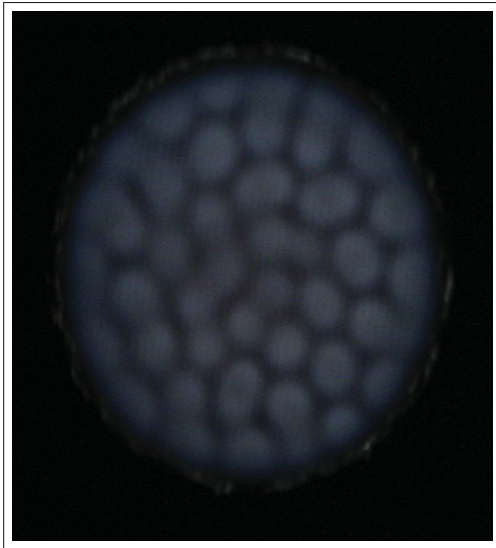


Figure 1.3 Flamme laminaire prémélangée hydrogène/air possédant un nombre de Lewis inférieur à 1 ($Le < 1$).
Tirée de : Matalon (2011)

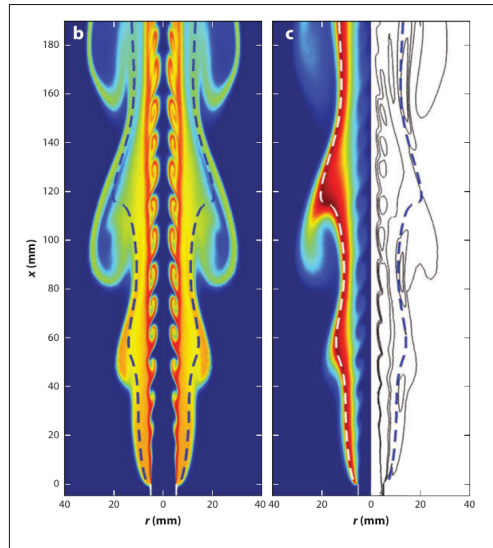


Figure 1.4 Simulation numérique d'une flamme laminaire pulsative.
Tirée de : Sánchez (2017)

1.3.2 Instabilité hydrodynamique

L'instabilité hydrodynamique, ou plus communément appelée "instabilité de Darrieus-Landau" fut d'abord prédite par Darrieus (1938) puis par Landau (1944), et fut étudiée expérimentalement pour la première fois en 1998 (Clanet (1998)). Elle est causée par une expansion thermique due au dégagement d'énergie des réactions chimiques.

Considérons une flamme légèrement perturbée comme sur la Figure 1.6. Le front de flamme n'est pas perpendiculaire à l'écoulement, de plus, l'expansion thermique causée par le dégagement d'énergie dû aux réactions a pour conséquence d'accroître la vitesse perpendiculaire au front de flamme des gaz brûlés : en effet, du fait de la conservation de la masse au travers de la

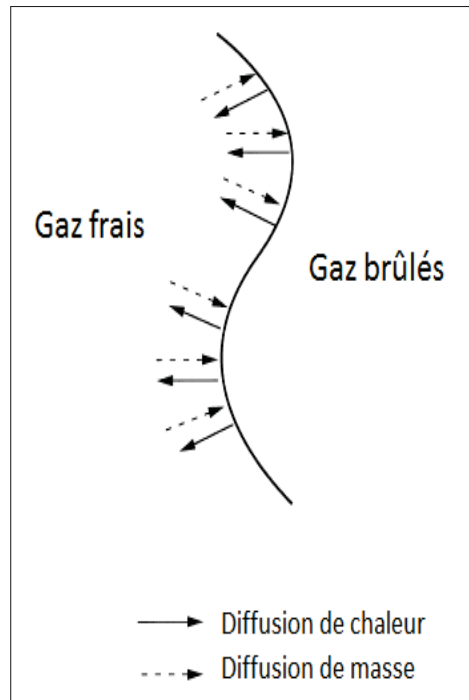


Figure 1.5 Instabilité
thermodiffusive.
Tirée de : Law (2000)

flamme, nous avons la relation suivante :

$$\rho_u A V_u = \rho_b A V_b \quad (1.2)$$

Et puisque $\rho_u > \rho_b$, ceci implique que $V_u < V_b$.

La vitesse tangentielle, quant à elle, est conservée au travers de la flamme via la conservation des moments, ce qui a pour conséquence de changer l'orientation des lignes de courant comme visible sur la Figure 1.6. Ce changement d'orientation induit une baisse de vitesse du fluide dans la partie convexe et une augmentation dans la partie concave, entraînant un "flash-back" (avancement de la flamme vers les gaz frais) dans la partie convexe et un "blow-off" (la flamme recule vers les gaz brûlés) dans la partie concave : le front de flamme devient donc de plus en plus plissé, permettant à la flamme de devenir de plus en plus cellulaire.

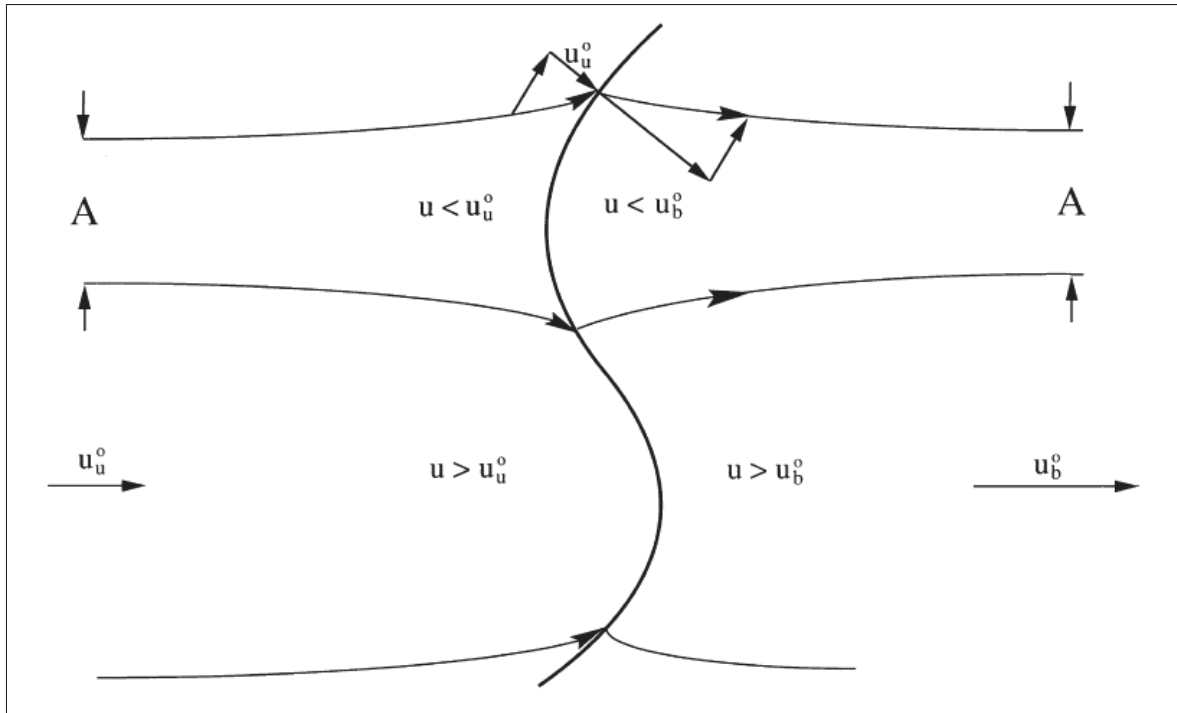


Figure 1.6 Instabilité hydrodynamique.
Tirée de : Law (2000)

1.3.3 Instabilité de Rayleigh - Taylor

Le dernier facteur pouvant être responsable de l'instabilité intrinsèque de la flamme est l'instabilité de Rayleigh-Taylor (Figure 1.7) qui peut se produire entre deux fluides de densité différente, lorsque le fluide le plus lourd (représenté par la zone rouge sur la Figure 1.7) pousse le fluide le plus léger (représenté par la zone bleue sur la Figure 1.7) sous l'effet de la gravité (Chandrasekhar (2013)). Ce phénomène peut apparaître dans la nature (par exemple l'eau au-dessus de l'huile et soumise à la gravité terrestre) ou bien dans les applications industrielles (transport d'aérosols (Hinds *et al.* (2002))). Cette instabilité ne sera pas considérée dans ce mémoire du fait que la gravité ne sera pas prise en compte, tel qu'effectué dans la littérature (Yu (2013), Kadowaki *et al.* (2005b), Altantzis *et al.* (2011)). Les différentes instabilités de la flamme laminaire ayant été présentées, la prochaine section se concentrera sur les différents travaux portant sur le phénomène de cellularité.

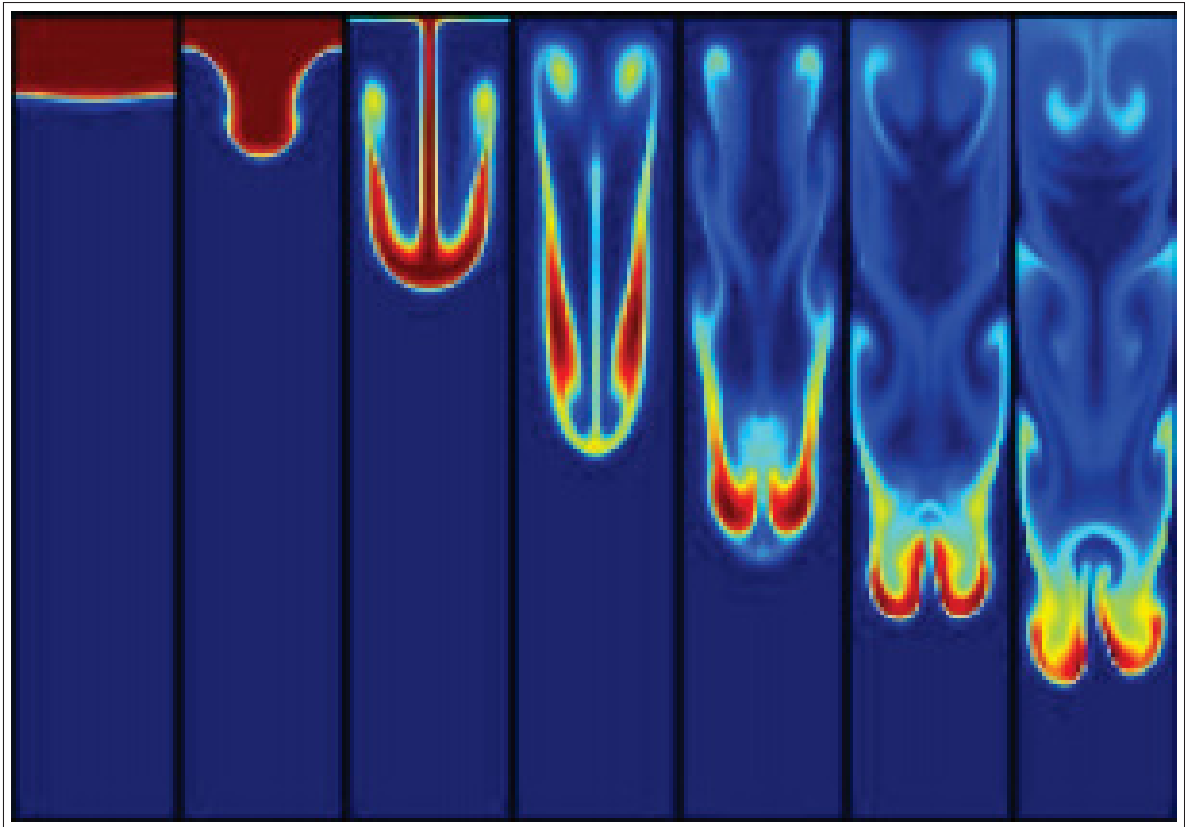


Figure 1.7 Simulation numérique d'une instabilité de Rayleigh-Taylor.
Tirée de : Štrubelj (2008)

1.4 Théorie et travaux actuels

Cette section se donne pour objectifs de présenter les résultats des différents travaux portant sur le phénomène de cellularité, et notamment de fournir des détails et des résultats vis-à-vis de l'influence de certains paramètres sur la création et le développement des cellules.

1.4.1 Théorie générale des instabilités

Les instabilités de front de flamme menant à la cellularité qui ont été évoquées précédemment ont été étudiées théoriquement (Landau (1944), Darrieus (1938), Markstein (1964), Linan (1993)) afin de théoriser le phénomène et de mettre en relation l'évolution du front de flamme en fonction de la perturbation imposée. Généralement, cette perturbation initiale est de

la forme :

$$A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t) \quad (1.3)$$

Où A et B sont les amplitudes initiales de la perturbation choisie, ω est la pulsation (fonction de la longueur d'onde λ ou du nombre d'onde k). La relation entre la pulsation de la perturbation et le nombre d'onde est appelée "Relation de dispersion" qui, pour une onde monochromatique de célérité c dans un milieu non dispersif est la suivante :

$$\omega = \frac{c}{n}k = \frac{c}{n} \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.4)$$

Où ω est la pulsation, c est la célérité, n est l'indice de réfraction du milieu, k le nombre d'onde et λ la longueur d'onde. Une des premières études théoriques de la propagation d'une flamme plissée en deux dimensions fut celle réalisée par Darrieus (1938) et Landau (1944), où ils développèrent la relation de dispersion suivante :

$$\omega_{LD} = \omega_0 k \quad (1.5)$$

Avec

$$\omega_0 = \frac{\sqrt{\sigma^3 + \sigma^2 - \sigma} - \sigma}{\sigma + 1} \quad (1.6)$$

Où $\sigma = \frac{\rho_u}{\rho_b}$, représentant le rapport de masse volumique gaz imbrûlés/gaz brûlés, et le front de flamme est supposé se propager à une vitesse constante S_0 .

Puis, en 1964, Markstein développa une théorie mettant en relation la vitesse de flamme locale S , le taux d'étirement κ et la longueur de Markstein ζ (Markstein (1964)) :

$$S = S_0(1 - \zeta \kappa) \quad (1.7)$$

Ce qui permet d'obtenir la relation de dispersion suivante :

$$\omega_{Ma} = \frac{\sqrt{\sigma^3(1 - 2\zeta \kappa) + \sigma^2(1 + \zeta^2 \kappa^2)} - \sigma - \sigma(1 + \zeta \kappa)}{\sigma + 1} k \quad (1.8)$$

Où $\omega > 0$ seulement lorsque $\sigma > 1$, $\zeta < 0$ et $k < k_c$ où k_c est le nombre d'onde critique :

$$k_c = \frac{\sigma - 1}{2\zeta\sigma} \quad (1.9)$$

Ainsi, théoriquement, les instabilités évoquées précédemment ne se développent que si la longueur d'onde de la perturbation initiale est supérieure à la longueur d'onde critique correspondant (puisque pour une perturbation avec une longueur d'onde plus faible que celle critique, la pulsation est négative et donc va s'atténuer), ce qui permet de définir la longueur d'onde critique par l'équation 1.10.

$$\lambda_c = \frac{2\pi}{k_c} \quad (1.10)$$

Plus tard, une nouvelle relation de dispersion fut théorisée par Matalon *et al.* (2003) :

$$\omega_{FS} = \frac{\sigma \ln \sigma (2\omega_0 + 1 + \sigma) - \sigma(1 - \sigma)^2 + \alpha \sigma(1 - \sigma)^2(\omega_0 + \sigma)(\omega_0 + 1)I(\sigma)}{2(1 - \sigma)[\sigma + (1 + \sigma)\omega_0]} \quad (1.11)$$

Où ω_{FS} est la pulsation, et $\alpha = \frac{Ea}{RT_b}(1 - Le)$, $I(\sigma) = \int_0^{\inf} \frac{\varepsilon e^{-\varepsilon}}{\sigma + (1 - \sigma)e^{-\varepsilon}} d\varepsilon$ et $\varepsilon = \frac{Ea}{RT_b}x$.

Cette relation de dispersion, à l'opposé de la précédente, prend en compte le nombre de Lewis, tout en supposant que les réactions chimiques sont des réactions globales et irréversibles. Enfin, une étude approfondie des instabilités de flammes prémélangées menée par Rastigejev (2006) a permis de développer une nouvelle fois une relation de dispersion, prenant cette fois-ci en compte les variables thermodynamiques et les termes visqueux :

$$\begin{aligned} \omega_{MCB} = \omega_0 k - \delta \left[\frac{1}{4} \frac{\sigma^3 - \sigma + 2\sigma^2(\omega_0 + \sigma + 1)}{\sigma + (\sigma + 1)\omega_0} \right] k^2 \\ - \delta \beta (Le_{eff} - 1) \left[\frac{1}{2} \frac{\sigma(\sigma - 1)(\omega_0 + 1)(\omega_0 + \sigma)}{\sigma + (\sigma + 1)\omega_0} \right] k^2 \\ - \delta Pr \left[\frac{1}{2} \frac{\sigma(\sigma - 1)^2}{\sigma + (\sigma + 1)\omega_0} \right] k^2 \end{aligned} \quad (1.12)$$

Où ω_{MCB} est la pulsation et $\delta = \frac{\rho_u C_p \delta_L S_L}{k}$. Cette relation de dispersion est supposée prendre en compte correctement les effets des instabilités hydrodynamiques et les effets de diffusion

massique, thermique mais également la viscosité. Cependant, il a été démontré qu'elle n'est valable que pour de petites longueurs d'onde (Yu (2013)).

Du fait que le phénomène de cellularité est un phénomène chaotique et hautement non linéaire, la théorie peine à prédire l'évolution du front de flamme une fois les instabilités intrinsèques de la flamme établies : c'est pourquoi de nombreuses études numériques sur ce phénomène ont vu le jour depuis trois décennies.

1.4.2 Études numériques

Une des premières études numériques sur les instabilités de flammes laminaires prémélangées fut celle réalisée par Michelson (1977). Celui-ci réalisa une étude numérique en deux dimensions dans des conditions spécifiques afin de provoquer chaque instabilité intrinsèque de la flamme : dans le cadre de conditions provoquant spontanément une instabilité hydrodynamique, une flamme laminaire perturbée mais non cellulaire fut observée, dans le cadre de conditions provoquant spontanément une instabilité thermodiffusive, une flamme turbulente cellulaire fut observée, et enfin dans le cadre de conditions permettant de provoquer spontanément les deux instabilités (hydrodynamique et thermo-diffusive) une flamme turbulente perturbée et cellulaire fut observée. Cette étude donna des premiers éléments de comparaison avec la théorie des instabilités de flammes prémélangées.

Plus tard, Patnaik *et al.* (1989) réalise une étude numérique en deux dimensions d'une flamme laminaire prémélangée et soumise à une perturbation. La simulation numérique utilise un modèle de combustion H_2/O_2 qui comporte 24 réactions élémentaires de huit espèces, et modélise la diffusion moléculaire de chaque espèce, ainsi que la conduction thermique et la convection. Les résultats présentés indiquèrent que pour le mélange pauvre, le front de flamme devenait perturbé et présentait une structure cellulaire, tel qu'observé expérimentalement. Au contraire, pour le mélange riche, la perturbation initiale s'estompait et aucune structure cellulaire n'apparaissait, confirmant les résultats expérimentaux observés par Mitani (1980). De plus, afin de mettre en évidence le rôle de la diffusion moléculaire dans le phénomène de cellularité, les

coefficients de diffusion binaire de H_2 et O_2 furent modifiés : lorsque le coefficient de diffusion binaire de H_2 fut imposé égal à celui de O_2 , la perturbation s'estompa alors que lorsque le coefficient de O_2 fut imposé égal à celui de H_2 , l'instabilité se développa quand même, en accord avec la théorie thermodiffusive des instabilités intrinsèques de la flamme.

Les instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives furent également étudiées en régime incompressible par Rastigejev (2006). Afin de prendre en compte correctement les effets d'expansion thermique, des masses volumiques différentes furent imposées pour les gaz frais et les gaz brûlés, ainsi que des termes sources singuliers. Les résultats présentés indiquèrent un comportement de la flamme en cohérence avec la théorie : les instabilités hydrodynamiques du front de flamme furent observées, ainsi que le front de flamme devenant plan dans des domaines trop petits, mais également le développement non-linéaire de structures creuses telles que prédites par l'équation de Michelson-Sivashinsky Michelson (1982) lorsque la masse volumique varie légèrement. Cette étude permis de mettre en lumière les effets de l'expansion thermique sur la dynamique du front de flamme.

L'étude numérique des instabilités de la flamme laminaire prémélangée ayant été présentée de manière globale, la prochaine section se concentrera sur la variation d'un des paramètres clés du phénomène de cellularité : le nombre de Lewis.

1.4.3 Effet du nombre de Lewis

L'effet du nombre de Lewis sur le phénomène de cellularité fut étudié par Yuan *et al.* (2005) qui simula numériquement une flamme se propageant librement, possédant un nombre de Lewis inférieur à 1 et soumise aux instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives. Les résultats de cette étude indiquèrent que les interactions entre les instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives entraînent des fusions et des divisions de cellules, ainsi que des extinctions locales, des mouvements latéraux des cellules, entraînant des fluctuations du fluide et des concentrations des espèces ainsi qu'une augmentation considérable de la vitesse de flamme. De plus, les résultats indiquèrent également que les domaines de calcul trop petits ($h < 20\delta_L$, où h représente

la hauteur du domaine et δ_L l'épaisseur de flamme laminaire) ne peuvent prédire correctement les divisions de cellules, résultant en un mouvement latéral des cellules.

Kadowaki *et al.* (2005b) réalisa également une étude sur l'effet du nombre de Lewis sur le comportement de la flamme, en régime compressible également mais cette fois ci avec un mécanisme de réaction ne comportant qu'une seule réaction chimique. Pour un nombre de Lewis de 0.5 la forme cellulaire du front de flamme change drastiquement au cours du temps, alors que pour un nombre de Lewis égal à 1, celle-ci se modifie très lentement, indiquant une influence très importante des effets thermodiffusifs sur le comportement instable des fronts de flammes cellulaires. Il fut également observé qu'un nombre de Lewis grandissant impliquait une taille moyenne des cellules plus importantes, ainsi qu'une vitesse de flamme moyenne diminuant.

Une étude fut également réalisée mais pour des nombre de Lewis supérieurs à l'unité ($Le=3.0$) (Yuan *et al.* (2006)). Premièrement, les résultats obtenus indiquèrent que l'augmentation du nombre de Lewis induisait une diminution brutale de l'intervalle pour lequel une perturbation initiale allait se développer. Deuxièmement, il fut également observé que trois régimes de flamme se distinguaient lorsque l'énergie d'activation était augmentée : le régime de propagation stable des cellules, le régime périodique de pulsation de flamme cellulaire et le régime de pulsation irrégulière de flamme cellulaire. Au sein du régime périodique de pulsation de flamme cellulaire, les effets de la pulsation sur la structure de la flamme furent observés et expliqués par l'effet dominant de l'instabilité hydrodynamique tandis que pour le régime de pulsation irrégulière de flamme cellulaire, des formations complexes de cellules au niveau du front de flamme furent observées, ainsi que des ondes se propageant sur le front de flamme, à cause de l'effet dominant de pulsations locales.

Les effets des instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives en trois dimensions furent étudiés par Kadowaki *et al.* (2015) pour des conditions de basses et de hautes températures et pour une cinétique chimique à une équation. Les relations de dispersion en trois dimensions

concordent avec celles en deux dimensions : au fur et à mesure que le nombre de Lewis diminue, la pulsation augmente ainsi que l'instabilité due aux effets thermodiffusifs.

L'influence du nombre de Lewis sur les instabilités ainsi que le comportement de la flamme ayant été précisé, le prochain paramètre dont l'influence sur la flamme va être présentée est la pression.

1.4.4 Effet de la pression

L'effet de la pression sur le comportement et le développement des cellules fut étudié, pour des flammes non-equidiffusives (Yuan *et al.* (2007) et Yu (2013)) et equidiffusives (Yuan *et al.* (2007)). Pour les deux types de flammes, l'augmentation de la pression entraîna une diminution de la taille des cellules. Cependant, dans le cadre des flammes non-equidiffusives ($Le < 1$), d'autres phénomènes apparaissent : le front de flamme devient moins épais et plus chaotique (il devient moins lisse et est plus dentelé), l'instabilité hydrodynamique est accentuée, la surface de flamme et le taux global de dégagement de chaleur augmentent du fait que le front de flamme devient plus froissé et que le nombre de cellules augmentent.

Altantzis *et al.* (2011) réalisa une étude à 5 atmosphères d'une flamme laminaire prémélangée H_2/O_2 , pour une richesse de 0.6 et en utilisant un mécanisme de réaction complet. Les résultats présentés indiquèrent qu'une augmentation de pression induisait une croissance du nombre total de cellules, ainsi qu'un front de flamme prenant une forme plus chaotique et moins lisse. Enfin, cette étude rejoint celle de Yu (2013) sur le mouvement latéral des cellules : avec l'augmentation de pression le mouvement latéral de cellules est accentué.

L'effet de la pression sur le comportement de la flamme ayant été précisé, la prochaine section se concentrera sur l'effet de la turbulence sur le phénomène de cellularité.

1.4.5 Effet de la turbulence

Les effets de la turbulence sur les instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives furent également étudiées : tout d'abord par Day *et al.* (2009) qui simula numériquement une flamme laminaire prémélangée de H_2/O_2 en régime turbulent et pour une richesse valant 0.37 afin de quantifier l'impact de la turbulence sur la structure cellulaire de la flamme. Les principales observations résultant de cette étude sont les suivantes : les flammes simulées se déplacent 3 à 8 fois plus rapidement que la théorie le prédit (pour une flamme unidimensionnelle plane laminaire), selon le niveau de turbulence, tout comme la vitesse de combustion globale moyenne. De plus, il fut observé que la surface de flamme augmente avec l'intensité de turbulence également, tout comme la taille des cellules.

L'impact de la turbulence sur le phénomène de cellularité fut également étudié par Kadowaki *et al.* (2005a), en régime compressible et pour un champ de vitesse non uniforme, pour un nombre de Lewis égal à l'unité et un nombre de Lewis valant 0.5, en utilisant un mécanisme de réaction ne comportant qu'une seule réaction chimique. Les principales observations dégagées de cette étude sont les suivantes : pour la flamme dont le nombre de Lewis vaut l'unité, l'évolution initiale de celle-ci est contrôlée par les perturbations provenant du champ de vitesse, après l'évolution initiale, les cellules fusionnent pour ne former qu'une seule cellule. Pour la flamme dont le nombre de Lewis vaut 0.5, des divisions et des fusions de cellules apparaissent, dues à l'effet thermodiffusif tout comme en régime laminaire. Tout comme visualisé dans l'étude de Day *et al.* (2009), la vitesse de combustion est plus élevée pour une flamme de structure cellulaire que pour une flamme plane et cette vitesse de combustion augmente avec l'intensité de turbulence. Il fut également observé que cette vitesse de combustion est beaucoup plus dépendante de l'intensité de turbulence pour un nombre de Lewis valant l'unité que pour un nombre de Lewis valant 0.5. Finalement, deux régimes furent identifiés dans le cadre de la combustion d'hydrogène en régime turbulent. Le premier, où lorsque l'intensité de turbulence est faible alors l'évolution de la flamme est gouvernée par l'instabilité hydrodynamique, et le deuxième lorsque l'intensité de turbulence est élevée, où l'évolution de la flamme est cette-fois ci gouvernée par la turbulence.

L'effet de la turbulence sur le comportement de la flamme ayant été précisé, la prochaine section portera sur l'impact des conditions initiales et la taille du domaine sur la cellularité.

1.4.6 Conditions initiales et taille du domaine

La variation de la taille du domaine de simulation fut également étudiée afin de visualiser son impact sur le phénomène de cellularité. L'étude de Yu (2013) permet d'observer que la taille du domaine a un impact important sur l'évolution de la flamme : le nombre de cellules ainsi que la forme du front de flamme sont très différents selon la taille du domaine utilisée, le reste des paramètres étant identiques pour les deux simulations. L'étude de Kadowaki *et al.* (2005b) présente les mêmes conclusions, pour des flammes equidiffusives et non-equidiffusives : cependant, pour les flammes non-equidiffusives, la variation du nombre total de cellules est beaucoup plus importante que pour les flammes equidiffusives, tout comme pour la vitesse des cellules qui est très dépendante de la taille du domaine utilisé.

Il a également été observé que, du fait de leur caractère non linéaire, les instabilités hydrodynamiques et thermodiffusives sont sensibles à l'ordre de résolution numérique ainsi qu'au maillage (Yu (2013)) : quatre simulations furent effectuées dans les mêmes conditions mais avec des ordres de résolution spatiaux et temporels différents. Les résultats obtenus indiquèrent un impact important de l'ordre du schéma de discrétisation temporelle du fait si celui-ci était trop faible (ordre 2 pour les schémas de discrétisation temporelle et spatiale, et ordre 5 pour les termes de convection des espèces et de l'équation de l'énergie), il pouvait induire une cassure de symétrie qui n'apparaissait dans aucune des autres simulations effectuées. L'impact de l'ordre du schéma de discrétisation spatiale fut également mis en lumière : le front de flamme devenant plus dentelé au fur et à mesure que l'ordre du schéma de discrétisation spatiale diminuait, ainsi que la taille des cellules qui diminuaient avec la diminution de l'ordre du schéma. De plus, l'étude de Altantzis *et al.* (2011) permis de mettre en évidence que pour des domaines larges ($h \gg 20\delta_T$) les effets hydrodynamiques dominant alors pour des domaines plus petits, ce sont les effets thermodiffusifs qui dominant.

Enfin, afin de provoquer les instabilités intrinsèques de la flamme, une nouvelle approche est apparue et consiste à forcer l'instabilité hydrodynamique de la flamme via un maillage particulier : celui-ci est irrégulier et délibérément grossier afin de créer une non-homogénéité du fluide (Kishore *et al.* (2011)). Cette étude permet de mettre en évidence que les instabilités intrinsèques de la flamme sont provoquées par l'instabilité hydrodynamique et accentuées ou diminuées par l'instabilité thermodiffusive, celles-ci conditionnées par le nombre de Lewis.

1.4.7 Synthèse du chapitre et définition des objectifs

Comme nous avons pu le voir dans le chapitre de revue de littérature, le phénomène de cellularité a été l'objet de nombreuses études, et ce au travers de l'influence de différents paramètres sur ce phénomène. Cependant, malgré la présence de nombreux mécanismes réduits de cinétiques chimiques (Kee *et al.* (1985), Davis *et al.* (2005), Connaire *et al.* (2004), UCSD (2016)), l'influence de la cinétique chimique sur le comportement de la flamme n'est jamais étudiée, tout comme l'influence de la loi de mélange des propriétés de ces mécanismes de réactions. De plus, les modèles présentés dans la littérature utilisant des schémas de discrétisation d'ordre de résolution élevé (ordre 6), il semble intéressant d'étudier l'influence d'un paramètre tel que la pression sur la création et le développement de la cellularité mais avec un logiciel commercial (STAR-CCM+) utilisant des schémas de discrétisation d'ordre de résolution moins élevé (ordre 2). Enfin, les études réalisées sur le phénomène de cellularité ne précisent ou ne justifient pas le choix des conditions initiales nécessaires à l'apparition des cellules, il semble donc intéressant d'étudier l'impact de la condition initiale sur ce phénomène.

Ce mémoire se veut donc pour objectif de caractériser l'influence des paramètres du modèle numérique sur la création et le développement des cellules à partir d'un logiciel commercial donc utilisant des schémas de discrétisation du second ordre. Cet objectif principal sera atteint à l'aide des sous-objectifs suivants : 1) Comparer quatre cinétiques chimiques, puis étudier l'influence de la loi de mélange sur la cellularité 2) Quantifier l'effet de la pression sur le développement des cellules 3) Quantifier l'effet de la perturbation initiale sur l'apparition et le développement des cellules.

CHAPITRE 2

MODÈLE NUMÉRIQUE

2.1 Résolution numérique des équations fondamentales

La simulation numérique d'écoulement dynamiques (CFD) est vastement utilisée de nos jours, du fait qu'elle permet de réduire l'effort en laboratoire et donc permet une réduction de coût pour les entreprises. Celle-ci permet de prédire les écoulements de fluides, le transfert thermique, les réactions chimiques, etc. via la résolution des équations mathématiques régissant ces phénomènes. Ce chapitre a pour but de présenter les différentes équations mathématiques résolues numériquement par le logiciel utilisé (STAR-CCM+) ainsi que les méthodes de résolution associées.

2.1.1 Équations de Navier-Stokes pour un écoulement compressible

Les équations de Navier-Stokes représentent la base de la mécanique des fluides, ce sont des équations aux dérivées partielles régissant le mouvement des fluides newtoniens en milieux continus. Ici, elles seront résolues pour un écoulement compressible. Il s'agit d'un système d'équations composé de :

- a. L'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.1)$$

- b. L'équation de bilan de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho f_i \quad (2.2)$$

- c. L'équation de bilan de l'énergie :

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + (\rho e + p) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial(\tau_{ij} u_j)}{\partial x_i} + \rho f_i u_i + \frac{\partial(\dot{q}_i)}{\partial x_i} \quad (2.3)$$

Où t représente le temps, ρ la masse volumique du fluide, u un vecteur vitesse, x_i la i -ème coordonnée du repère utilisé, p la pression, τ le tenseur des contraintes de cisaillement, f les forces volumiques, \dot{q} le flux de chaleur et e l'énergie totale. Les transferts radiatifs n'ont pas été pris en compte dans ce modèle du fait qu'ils induisent une augmentation du temps de calcul non nécessaire puisque les flammes H_2/O_2 sont peu lumineuses et sont donc le siège de peu de transferts radiatifs. La gravité et les effets Dufour/Soret ne sont également pas pris en compte comme effectué dans la littérature (Yu (2013), Regele *et al.* (2013), Kishore *et al.* (2011)) du fait de leur influence négligeable sur ce genre d'écoulement. De plus, l'écoulement est considéré à faible nombre de Mach (Regele *et al.* (2013), Yu (2013) et Altantzis *et al.* (2011)), ainsi la pression est décomposée en une partie thermodynamique $P(t)$ et une partie hydrodynamique $p(x,t)$. Les équations de Navier Stokes (2.1, 2.2 et 2.3) vont être ensuite résolues par la méthode des volumes finis, que nous allons détailler.

2.1.1.1 Méthode des volumes finis

Sous STAR-CCM+, la méthode des volumes finis est appliquée pour les fluides Newtoniens, les fluides multiphasés et le transfert de chaleur (CD-Adpaco). Cette méthode consiste à subdiviser le domaine de simulation en un nombre fini de volumes de contrôle, qui correspondent aux mailles du volume discrétisé. Les versions discrètes des formes intégrales des équations de transport sont appliquées à chaque volume de contrôle. L'objectif est d'obtenir un système linéaire d'équations algébriques, dont le nombre total d'inconnues de chaque système correspond au nombre de mailles du maillage. La forme générale de l'équation de transport est la suivante (CD-Adpaco) :

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \phi}{\partial t}}_{\text{Taux de variation}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho u \phi)}_{\text{Taux de convection}} = \underbrace{\nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla (\phi))}_{\text{Taux de diffusion}} + \underbrace{S_\phi}_{\text{Terme source}} \quad (2.4)$$

Cette équation représente le transport d'une quantité scalaire ϕ au sein du domaine de simulation. Les termes de l'équation, de gauche à droite, sont respectivement : le terme de taux de variation, de convection, de diffusion et le terme source de la grandeur ϕ . Ensuite, le domaine

de simulation va être divisé en volumes de contrôle afin d'intégrer l'équation 2.4 sur chacun de ces volumes de contrôle. Pour cela, considérons un volume de contrôle V_0 centré au point A et ayant S_i surfaces le séparant des volumes de contrôle voisins. L'intégration de l'équation 2.4 nous donne (CD-Adpaco) :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho \phi dV + \int_{V_0} \nabla \cdot \rho \phi u dV = \int_{V_0} \nabla \cdot \Gamma_\phi \nabla (\phi) dV + \int_{V_0} S_\phi dV \quad (2.5)$$

Or le théorème de Green-Ostrogradski (ou théorème de flux-divergence) nous permet d'écrire que :

$$\int_V \nabla \cdot F dV = \oint_S F \cdot dS \quad (2.6)$$

Donc l'équation 2.5 devient :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_0} \rho \phi dV + \sum_i \oint_{S_i} (\rho \phi u) \cdot dS_i = \sum_j \oint_{S_i} [\Gamma_\phi \nabla (\phi) \cdot dS_i] + \int_{V_0} S_\phi dV \quad (2.7)$$

L'étape suivante est alors de discrétiser cette équation afin de pouvoir la résoudre sur chaque volume de contrôle. Sa forme discrétisée est la suivante :

$$\frac{d}{dt} [\rho \phi V]_A + \left[\sum_i (\rho \phi u)_i \cdot S_i \right]_A = \left[\sum_i (\Gamma_\phi \nabla (\phi)) \cdot S_i \right]_A + [S_\phi V]_A \quad (2.8)$$

Cette équation va ensuite être résolue pour chaque volume de contrôle du domaine, pour chaque instant t et pour chaque grandeur transportée.

2.1.2 Discrétisation des équations

Les équations présentées précédemment sont résolues via des schémas de discrétisation, c'est-à-dire que le domaine de calcul est scindé en mailles afin de calculer la valeur des termes de ces équations en chacun des points de ces mailles. Ces schémas de discrétisation se divisent en deux catégories : les schémas explicites et les schémas implicites. Un schéma explicite est un schéma de la forme :

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t H^n(u) \quad (2.9)$$

La partie droite de l'équation ne dépend que des variables aux temps précédents et la matrice à inverser est diagonale. Le schéma explicite nécessite donc moins de ressources de calcul, la solution donnée est généralement précise si le pas de temps Δt et le pas spatial Δx sont suffisamment petits et respectent les critères de stabilité, ce genre de schéma est de plus facile à programmer. Cependant, il est contraint par sa stabilité et requière généralement un pas de temps très faible afin de respecter ce critère (Nath (2013)).

L'autre type de schéma de discrétisation est le schéma de type implicite, de la forme :

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t H^{n+1}(u) \quad (2.10)$$

La partie droite de l'équation dépend de variables au même pas de temps, et donc nécessite de résoudre à chaque pas de temps un système linéaire dont la matrice est symétrique, tridiagonale et à diagonale dominante. Le schéma implicite ne nécessitant pas de condition de stabilité, celui-ci est moins contraignant que le schéma explicite. Cependant, ce genre de schéma nécessite plus de puissance de calcul et est plus difficile à programmer (Nath (2013)). Dans notre cas, les équations de Navier-Stokes sont résolues selon un schéma de discrétisation temporelle implicite d'ordre 2 et un schéma de discrétisation spatiale explicite d'ordre 2, le choix de ces schémas sera détaillé dans leur section respective : 2.3.1 et 2.3.2

2.1.2.1 Discrétisation temporelle

Deux schémas de discrétisation temporelle sont proposés par STAR-CCM+ : le premier étant du premier ordre et le deuxième du second ordre, tous les deux étant de type implicite puisqu'ils font référence au temps $n+1$ pour le calcul. En considérant un volume de contrôle centré au point A, la formulation du schéma du second ordre est la suivante (CD-Adpaco) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi V)_0 = \frac{(\alpha^2 - 1) [(\rho \phi V)_0^{n+1} - (\rho \phi V)_0^n] + [(\rho \phi V)_0^{n-1} - (\rho \phi V)_0^n]}{\alpha (\alpha - 1) \Delta t^{n+1}} \quad (2.11)$$

$$\text{Où } \alpha = 1 + \frac{t^{n+1} - t^n}{t^n - t^{n-1}} \quad (2.12)$$

La différence principale entre ces deux schémas est la vitesse de calcul : en effet, un schéma d'ordre 1 requiert moins de temps de calcul qu'un schéma d'ordre 2, cependant augmenter l'ordre de résolution des schémas numériques permet de réduire les erreurs numériques (CD-Adpaco). Le pas de temps est également un facteur important puisque si celui-ci est trop élevé, la vitesse de calcul est augmentée mais peut conduire à une divergence de la simulation ou à une solution non réaliste. Le choix de l'ordre du schéma de discrétisation temporelle ainsi que du pas de temps seront détaillés dans la section 2.3.1.

2.1.2.2 Terme source

La discrétisation du terme source est imposée par STAR-CCM+ de la manière suivante, pour un volume de contrôle centré au point A (CD-Adpaco) :

$$\int_V S_\phi = (S_\phi V)_A \quad (2.13)$$

STAR-CCM+ approxime l'intégrale du terme source de la grandeur ϕ par le produit de la valeur de ce terme source au point A et le volume V_A du volume de contrôle.

2.1.2.3 Terme de convection

Le terme de convection est discrétisé de la manière suivante, pour une face S (CD-Adpaco) :

$$[\phi \rho (u \cdot a)]_S = (\dot{m} \phi)_S = \dot{m}_S \phi_S \quad (2.14)$$

Où ϕ_S et \dot{m}_S sont respectivement les valeurs de la grandeur scalaire et du flux massique à la face S .

En régime laminaire, trois schémas de discrétisation sont disponibles pour ce terme (CD-Adpaco) :

- Un schéma "Upwind" du premier ordre.
- Un schéma "Upwind" du deuxième ordre de la forme :

$$(\dot{m}\phi)_S = \begin{cases} \dot{m}_S \phi_{S,0} & \text{Si } \dot{m}_S \geq 0 \\ \dot{m}_S \phi_{S,1} & \text{Si } \dot{m}_S < 0 \end{cases} \quad (2.15)$$

Où les valeurs de $\phi_{S,0}$ et $\phi_{S,1}$ sont interpolées linéairement à partir des valeurs des autres cellules de part et d'autre de la face S :

$$\phi_{S,0} = \phi_0 + (x_S - x_0) \cdot (\Delta\phi)_{r,0} \quad (2.16)$$

$$\phi_{S,1} = \phi_1 + (x_S - x_1) \cdot (\Delta\phi)_{r,1} \quad (2.17)$$

- Un schéma de troisième ordre "Hybrid MUSCL".

Le choix du schéma de discrétisation spatiale sera détaillé dans la section 2.3.2.

2.1.2.4 Terme de diffusion

Le flux diffusif d'une quantité scalaire ϕ à l'intérieur d'une face S est résolu via le schéma de discrétisation d'ordre 2 suivant (CD-Adpaco) :

$$D_S = \Gamma_S \nabla \phi_S \cdot a$$

$$D_S = \Gamma_S \left[(\phi_1 - \phi_0) \vec{\alpha} \cdot a + \frac{(\nabla \phi_0 + \nabla \phi_1)}{2} \cdot \vec{\alpha} - \left(\frac{(\nabla \phi_0 + \nabla \phi_1)}{2} \cdot (x_1 - x_0) \right) \vec{\alpha} \cdot a \right] \quad (2.18)$$

$$\text{Où } \vec{\alpha} = \frac{a}{a \cdot (x_1 - x_0)} \quad (2.19)$$

Les différents schémas de discrétisation disponibles ayant été présentés, nous allons maintenant aborder l'équation de transport des espèces.

2.1.3 Transport des espèces

En plus de la résolution des équations de Navier-Stokes, du fait de la présence d'espèces chimiques réagissantes, il est nécessaire de résoudre l'équation de transport des espèces. Sa formulation générale est la suivante (CD-Adpaco) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k + F_{k,j}) = \omega_k \quad (2.20)$$

Où ρ est la masse volumique du mélange, Y_k est la fraction massique de l'espèce k , u_j est la j -ième composante de la vitesse, $F_{k,j}$ est le flux de diffusion de l'espèce k dans la direction j et le terme source ω_k est le taux de production de l'espèce k .

Pour un mélange composé de N espèces chimiques, il va être introduit N équations de transport au sein du système. Cette équation, couplée à l'équation de continuité, (2.1) permet d'obtenir une actualisation des fractions molaires au sein du domaine à chaque pas de temps. Cet algorithme prend en compte les différentes échelles de temps impliquées dans les réactions chimiques et le domaine du fluide. L'intégration temporelle de l'état chimique (les fractions massiques des espèces Y_k et l'enthalpie h) est effectuée en deux étapes (CD-Adpaco) :

- Au début de chaque pas de temps, l'état chimique est intégré de l'état $(Y_k, h)^n$ à l'état $(Y_k, h)^*$, en prenant seulement en compte le terme source :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_k = \omega_k \quad (2.21)$$

- Puis il est intégré de l'état $(Y_k, h)^*$ à l'état $(Y_k, h)^{n+1}$ sans le terme source, et les équations suivantes sont résolues :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho Y_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k + F_{k,j}) = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}h + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j h + F_{h,j}) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (2.23)$$

L'équation de transport des espèces ainsi que sa méthode de résolution ayant été présentée, la prochaine section se concentrera sur le domaine de simulation utilisé.

2.2 Domaine de simulation

La géométrie utilisée dans toutes les simulations est un carré de 0.02 m (20 mm) de côté. Le choix de cette géométrie, utilisée par Regele *et al.* (2013) fut conditionné par la nécessité d'utilisation d'une géométrie simple du fait que l'utilisation de cinétiques de réactions complètes requiert beaucoup de puissance de calcul et induit un temps de calcul plutôt élevé. De plus, afin d'obtenir des résultats cohérents et physiquement possible, un maillage adéquat est nécessaire : il ne doit pas être trop grossier sous peine de perdre des informations voire de faire diverger les calculs (gradients trop élevés entre deux mailles), et ne doit pas être trop fin pour éviter de consommer trop de ressources de calcul. Le maillage utilisé ici est un maillage tiré de Regele *et al.* (2013). Il s'agit d'un maillage régulier possédant 160 000 mailles (400×400 mailles), dont la taille des mailles a été fixée à $5 \times 10^{-5} \text{ m}$ ($\frac{\delta_{L_{atm}}}{\Delta x} \simeq 12$). Une étude de maillage sera effectuée dans la section 2.3.5.

2.3 Construction du modèle numérique

Le but de cette section est de présenter les différents choix de modèles effectués dans ce mémoire : dans un premier temps le choix du schéma de discrétisation temporelle ainsi que le pas de temps associé sera explicité, dans un second temps le schéma de discrétisation spatiale sera également justifié. Les modèles de chimie utilisés seront également présentés pour ensuite expliciter les conditions initiales et conditions aux limites. Enfin, une étude de maillage sera effectuée avant de conclure sur la synthèse du modèle numérique utilisé. Nous rappelons que les simulations ont toutes été effectuées en deux dimensions, en régime laminaire, compressible et instationnaire.

2.3.1 Choix du schéma de discrétisation temporelle

Dans un premier temps, le schéma temporel explicite fut testé. Cependant, STAR-CCM+ fixant le pas de temps en schéma explicite à environ 10^{-9} s afin de respecter la condition de stabilité propre à ce genre de schémas, ce schéma ne fut pas retenu puisque celui-ci impliquait un temps de calcul beaucoup trop élevé.

Le schéma implicite fut ensuite testé, ce genre de schéma ne requérant pas de pas de temps minimum afin de garantir une stabilité du modèle et de la convergence, un premier pas de temps de 10^{-7} avec 50 itérations par pas de temps fut testé. Ici encore, le temps de calcul estimé fut trop long (de l'ordre de deux mois) et ne fut pas retenu. Ce même pas de temps fut ensuite testé avec 20 itérations par pas de temps mais induisait un temps de calcul encore trop long (environ un mois). Le troisième et dernier pas de temps testé, de 10^{-6} s avec 20 itérations par pas de temps, fut retenu du fait qu'il conduisait à une convergence des calculs, avec des résidus inférieurs à 10^{-7} pour la quantité de mouvement et 10^{-8} pour la continuité, ainsi qu'un temps de calcul d'approximativement deux semaines sur Guillimin en utilisant 144 processeurs.

Le choix du schéma de discrétisation temporelle (implicite ici) et du pas de temps (10^{-6} s) fut ici conditionné par l'utilisation de cinétiques chimiques complètes, ce qui induit un temps de calcul élevé. Ainsi le pas de temps choisi fut décidé en tant que compromis entre ces deux paramètres.

2.3.2 Choix du schéma de discrétisation spatiale

Comme nous l'avons vu dans la section 2.1.2.3, pour la discrétisation spatiale du terme convectif, trois schémas de discrétisation sont disponibles en régime laminaire : un premier ordre "Upwind", un second ordre "Upwind" et un troisième ordre "Hybrid MUSCL". Seuls les deux derniers schémas furent testés du fait que le schéma "Upwind" du premier ordre est déconseillé par STAR-CCM+ car celui-ci entraîne trop de dissipation numérique dans le temps, ce que nous voulons éviter puisque que l'utilisation du schéma de discrétisation temporelle implicite

d'ordre 2 induit déjà de la dissipation numérique dans le temps. Le schéma de troisième ordre de type "Hybrid MUSCL" fut testé mais entraîna une divergence de la solution, car comme précisé par le manuel de STAR-CCM+, celui-ci ne garantit pas de fonctionner dans toutes les situations ou conditions physiques, malgré son ordre supérieur par rapport aux autres schémas (CD-Adpaco). Ainsi, le seul choix restant fut l'utilisation du schéma de discrétisation spatiale de deuxième ordre "Upwind". Le schéma de discrétisation spatiale ainsi que le schéma de discrétisation temporelle ayant été choisis, les modèles chimiques utilisés vont être présentés.

2.3.3 Choix des modèles chimiques

De la même manière que la simulation numérique d'un écoulement turbulent nécessite un modèle de turbulence, la simulation numérique d'une combustion nécessite l'utilisation d'un modèle de combustion : cette section se donne pour but de présenter et détailler le modèle de combustion utilisé, ainsi que les propriétés qui en découlent.

Le modèle de combustion utilisé dans ce mémoire ("Complex chemistry", CD-Adpaco) emploie des cinétiques chimiques détaillées, et est considéré comme robuste et précis mais entraîne un temps de calcul plus long que les autres modèles de chimie, mais ceci permet de contrebalancer légèrement avec le pas de temps choisi précédemment. Ce modèle permet d'importer les espèces, leur propriétés ainsi que les réactions chimiques associées selon le standard Chemkin (un fichier contenant le mécanisme de réaction, un fichier contenant les propriétés thermodynamiques des espèces et un fichier contenant les propriétés de transport des espèces), facilitant ainsi l'utilisation puisqu'il s'agit d'un format très largement utilisé en combustion. Au total quatre cinétiques chimiques seront testées dans le chapitre 3, puis une seule sera choisie afin d'être utilisée dans le reste de ce mémoire (chapitre 4 et 5). Le détail des mécanismes de réactions associés à chaque cinétique chimique est disponible en annexe (annexes II.1, II.2, II.3 et II.4) et ces mécanismes de réaction seront plus amplement détaillés dans le chapitre 3.

Aux propriétés des espèces s'ajoutent les propriétés du mélange qui sont quant à elles spécifiées par l'utilisateur et sont définies selon des lois de mélange. Pour commencer, définissons

la première loi de mélange utilisée pour la diffusivité moléculaire qui est la suivante (CD-Adpaco) :

$$D_m = \frac{1 - X_m}{\sum_{i=1, i \neq m}^N \frac{X_i}{D_{i,m}}} \quad (2.24)$$

Où D_m est la diffusivité moléculaire de l'espèce m , X_i est la fraction molaire de l'espèce i , et $D_{i,m}$ est le coefficient de diffusion binaire des espèces i et m dont l'expression, basée sur les travaux de Chapman-Enskog (Poling *et al.* (2001)) est la suivante :

$$D_{i,m} = \frac{2.66 \times 10^{-7} T^{\frac{3}{2}}}{p M_{i,m}^{\frac{1}{2}} \sigma_{i,m}^2 \Omega(T^*)} \quad (2.25)$$

Avec :

$$M_{i,m} = \frac{2M_i M_m}{M_i + M_m} \quad (2.26)$$

Où M_i est la masse moléculaire de l'espèce i , $\sigma_{i,m}$ est la longueur caractéristique de Lennard-Jones (diamètre de collision) pour la paire d'espèce i et m , p est la pression statique, $\Omega(T^*)$ est l'opérateur (ou noyau) de collision qui est une fonction de la température réduite, définie de la manière suivante :

$$T^* = \frac{k_b T}{\varepsilon_{i,m}} \quad (2.27)$$

Où k_b est la constante de Boltzmann ($k_b = 1.3806503 \times 10^{-23} m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$), T est la température et $\varepsilon_{i,m}$ est l'énergie caractéristique de Lennard-Jones pour la paire d'espèce i et m .

Dans un premier temps, une première loi de mélange fut testée (chapitre 3) pour la conductivité thermique, la viscosité dynamique et la chaleur spécifique du mélange, il s'agit d'une loi de mélange basée sur la fraction massique des espèces :

$$\mu_{mix} = \sum_{i=1}^N Y_i \phi_i \quad (2.28)$$

Avec μ_{mix} la viscosité dynamique du mélange, Y_i la fraction massique de l'espèce i , μ_i la viscosité dynamique de l'espèce i et N le nombre total d'espèces du mélange. Cette loi de mélange, contrairement à la loi de mélange que nous allons présenter après, oblige l'utilisateur à définir les chaleurs spécifiques, les conductivités thermiques et viscosités dynamiques des espèces présentes. Ces fonctions sont définies en fonction de la température et sont disponibles en annexe (annexe I.1). Ces fonctions ont été implémentées pour les espèces majoritaires, c'est-à-dire $H_2/O_2/N_2/H_2O/OH$ par manque de données sur les autres espèces minoritaires, mais également du fait que les fractions molaires de ces espèces représentent 99.97% de la réaction et justifient donc un impact négligeable des conductivités thermiques et viscosité dynamiques des autres espèces. De plus, cette simplification offre potentiellement un gain de temps de calcul. Cependant, cette loi de mélange (équation 2.28) se basant sur la fraction massique des espèces pour calculer la propriété du mélange, elle est adaptée afin de calculer la chaleur spécifique du mélange mais ce n'est cependant pas la plus adaptée pour calculer la conductivité thermique et la viscosité dynamique de celui-ci du fait de l'utilisation d'espèces possédant une masse volumique faible. Ainsi, une nouvelle loi de mélange fut testée (section 3.3), il s'agit de la loi de mélange "Mathur-Saxena Averaging" (Warnatz *et al.* (2006)) :

$$\phi = \frac{1}{2} \left(\sum_1^n X_i \phi_i + \left(\sum_i^n \frac{X_i}{\phi_i} \right)^{-1} \right) \quad (2.29)$$

Où ϕ représente la propriété du mélange (ici la viscosité dynamique ou la conductivité thermique), ϕ_i cette même propriété de l'espèce i et X_i la fraction molaire de l'espèce i . Une fois ce modèle sélectionné, chaque viscosité dynamique de chaque espèce est calculée via l'équation de Chapman-Enskog (Poling *et al.* (2001)) :

$$\mu_i = 2.6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega(T^*)} \quad (2.30)$$

Et la conductivité thermique via la théorie cinétique (Hirschfelder *et al.* (1964)) :

$$k_i = \frac{\mu_i}{M_i} (f_{trans} C_{v,trans} + f_{rot} C_{v,rot} + f_{vib} C_{v,vib}) \quad (2.31)$$

Le détail de chaque paramètre présenté dans l'équation 2.31 est disponible en annexe (annexe I.3). Cette loi de mélange peut être considérée comme plus adaptée que la loi de mélange basée sur la fraction massique présentée précédemment, puisque celle-ci se base sur la fraction molaire des espèces. Cependant, puisque la conductivité thermique et la viscosité dynamique de chaque espèce sont calculées (et non seulement celles des espèces principales) elle entraîne un temps de calcul plus long (environ le double) que la loi de mélange se basant sur la fraction massique.

Une fois les modèles de simulation choisis, l'étape suivante dans la construction d'un modèle numérique est la définition des conditions initiales et des conditions aux limites du modèle, celles-ci vont être présentées dans la prochaine section.

2.3.4 Conditions initiales et conditions aux limites

Dans le but d'obtenir une physique réaliste du modèle il est nécessaire d'imposer les bonnes conditions initiales et les bonnes conditions aux limites afin de garantir une stabilité du modèle, et de favoriser sa convergence vers une solution. Nous allons dans un premier temps définir les conditions initiales qui ont été utilisées, puis nous ferons de même avec les conditions aux limites.

Comme il a été précisé dans la revue de littérature (chapitre 1), une perturbation initiale est utilisée afin de faire apparaître les instabilités intrinsèques de la flamme (instabilité hydrodynamique et instabilité thermodiffusive, l'absence de gravité permettant de négliger les instabilités de Taylor-Raileigh). Cette perturbation est effectuée via une initialisation du front de flamme sous la forme d'une sinusoïde (Regele *et al.* (2013)) comme présenté selon l'équation 2.32.

$$x = (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \quad (2.32)$$

Où x et y sont les coordonnées du domaine de simulation, W est la longueur du domaine ($W=20$ mm), b est le décalage afin de positionner la perturbation à $x=15$ mm ($b=5$ mm), H est

la hauteur du domaine ($H=20$ mm). Les amplitudes de perturbation A et B sont $A=20\text{ }\mu\text{m}$ et $B=50\text{ }\mu\text{m}$ (chapitre 3 et 4), ces amplitudes de perturbation seront modifiées dans le chapitre 5 afin d'étudier leur impact sur la cellularité.

Cette initialisation sinusoïdale du front de flamme est effectuée de la sorte : à gauche de la fonction sinusoïdale, le domaine est initialisé avec les réactifs $H_2/O_2/N_2$ (en respectant une richesse de 0.4, correspondant à un nombre de Lewis de 0.3 (Regele *et al.* (2013)) et à une température T de 300 K. À droite de la fonction sinusoïdale, le domaine est initialisé avec les produits $H_2O/O_2/N_2$ (en respectant la même richesse également) et à une température de 1500 K. De ce fait, la combustion est forcée, tout en respectant la condition initiale du front de flamme imposée comme présenté sur la Figure 2.1. Enfin, la pression de référence est prise telle que $P=1$ atm, cette valeur sera modifiée dans le chapitre 4 afin d'en étudier l'impact sur la cellularité.

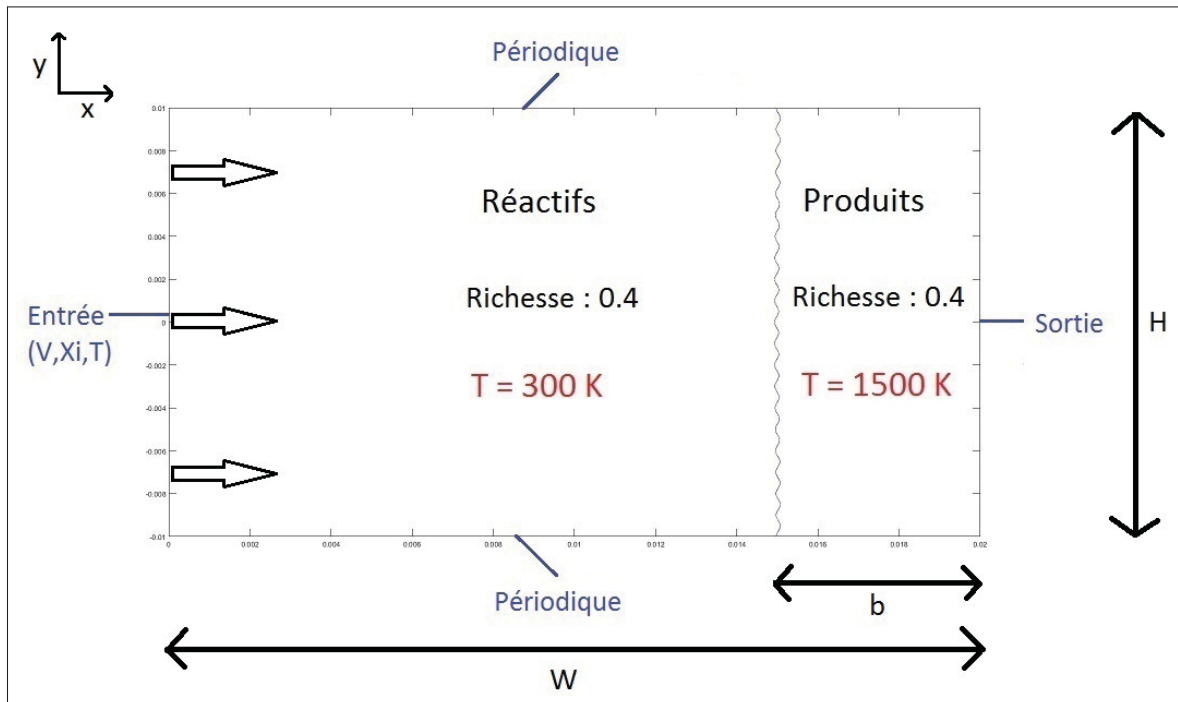


Figure 2.1 Initialisation du domaine

Les fonctions d'initialisation des espèces chimiques sont définies de la manière suivante :

$$X_i = \begin{cases} X_{i_{réactif}} & x \leq (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \\ X_{i_{produit}} & x > (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \end{cases} \quad (2.33)$$

et la fonction d'initialisation de la température :

$$T = \begin{cases} 300K & x \leq (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \\ 1500K & x > (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \end{cases} \quad (2.34)$$

Les conditions initiales ayant été définies et justifiées, nous allons pouvoir présenter les conditions aux limites qui ont été choisies. Dans toutes les simulations réalisées, peu importe la chimie utilisée, les conditions aux limites sont les suivantes :

- L'entrée présentée sur la Figure 2.1 est choisie comme une entrée de fluide possédant trois paramètres :

Les fractions molaires des espèces entrantes, pour une richesse de 0.4, les fractions molaires de H_2 , O_2 et N_2 valent respectivement : $\chi_{H_2} \simeq 0,14388$, $\chi_{O_2} \simeq 0,17986$ et $\chi_{N_2} \simeq 0,67626$ (valeurs calculées via le logiciel Chemkin).

La vitesse d'entrée, prise comme la vitesse de flamme laminaire pour chaque cinétique chimique utilisée (Sandia, Davis, San Diego, LLNL) , et calculée pour chacune via Chemkin selon Ouimette (2009). Les valeurs des vitesses de flammes laminaires de chaque cinétique chimique seront données dans le chapitre 3.

La température statique d'entrée, choisie telle que $T_e = 300$ K.

- Au sein de la sortie sont appliquées des conditions aux limites de Dirichlet dans un premier temps (chapitre 3) puis des conditions de Neumann (zéro gradients, chapitre 4 et 5) tel qu'effectué par Yu (2013) et Altantzis *et al.* (2011). Le changement de cette condition sera explicité dans la section 3.3.2.

- Les conditions aux limites latérales sont considérées périodiques comme suggéré par Regele *et al.* (2013), Yu (2013) et Altantzis *et al.* (2011).

2.3.5 Étude de maillage

Comme nous l'avons expliqué dans la section 2.3.4, le phénomène de cellularité est un phénomène dépendant de l'ordre de résolution des schémas numériques et du maillage (Yu (2013), Kadowaki *et al.* (2005a)) : un maillage trop grossier peut entraîner des perturbations du fluide, pouvant donner naissance aux instabilités intrinsèques de la flamme (Kishore *et al.* (2011)) mais dont l'apparition n'est pas contrôlée entièrement ce que nous voulons éviter ici. Ainsi, une étude de maillage va être réalisée afin de trouver le maillage adéquat. Dans toute l'étude de maillage réalisée, la combustion d'une flamme laminaire prémélangée H_2/O_2 est simulée, cependant, le front de flamme est initialisé de manière plane afin d'éviter le phénomène de cellularité qui va par la suite être étudié. Au total, trois différents maillages vont être testés :

- Le premier maillage est un maillage d'environ 80 000 cellules (80656 cellules exactement, correspondant à un maillage de 284x284), et chaque maille possède une longueur d'environ 7.1×10^{-5} m.
- Le deuxième maillage est un maillage de 160 000 cellules (correspondant à un maillage de 400x400), et chaque maille possède une longueur de 5×10^{-5} m.
- Le troisième et dernier maillage testé est un maillage d'environ 320 000 cellules (320356 cellules exactement, correspondant à un maillage de 566x566), et chaque maille possède une longueur d'environ 3.5×10^{-5} m.

Les Figures 2.2 et 2.3 représentent l'évolution de la température entre 2.5 et 10 ms à 2.5 ms d'intervalle. Pour la Figure 2.2, les quatre images du haut correspondent au maillage 284x284 et celles du bas au maillage 400x400. Pour la Figure 2.3 les quatre images du haut correspondent au maillage 400x400 et celles du bas au maillage 566x566.

Une observation rapide des Figures 2.2 et 2.3 nous permet d'observer que les trois maillages ne présentent aucune différence majeure, visuellement parlant. Cependant, le tableau 2.1 présente

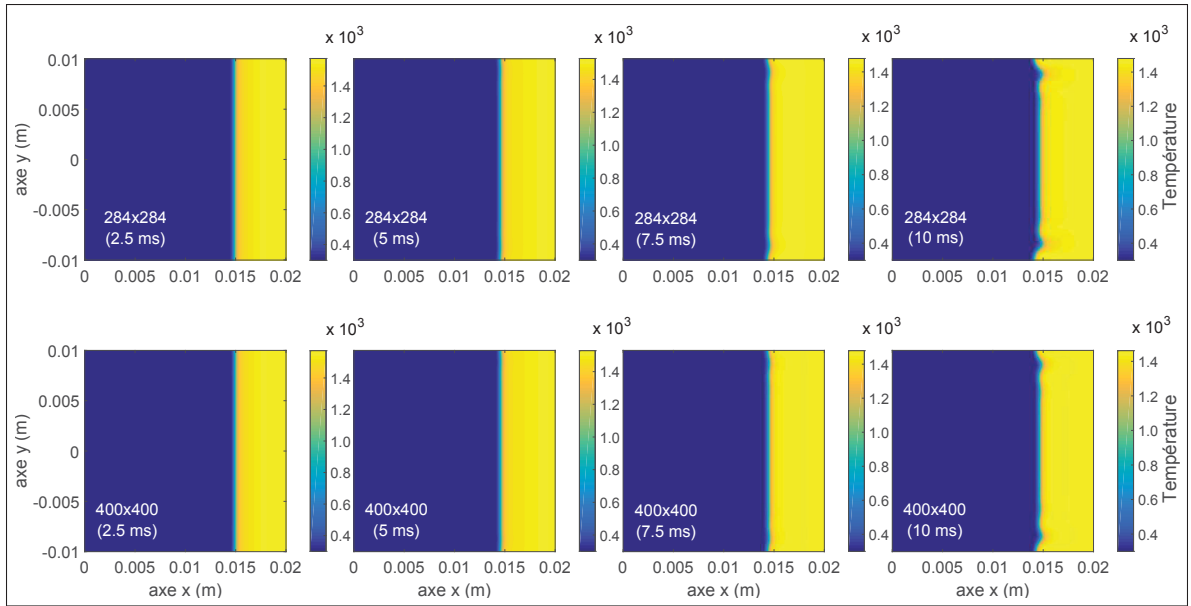


Figure 2.2 Évolution de la température au cours du temps pour le maillage 284×284 (images du haut) et le maillage 400×400 (images du bas)

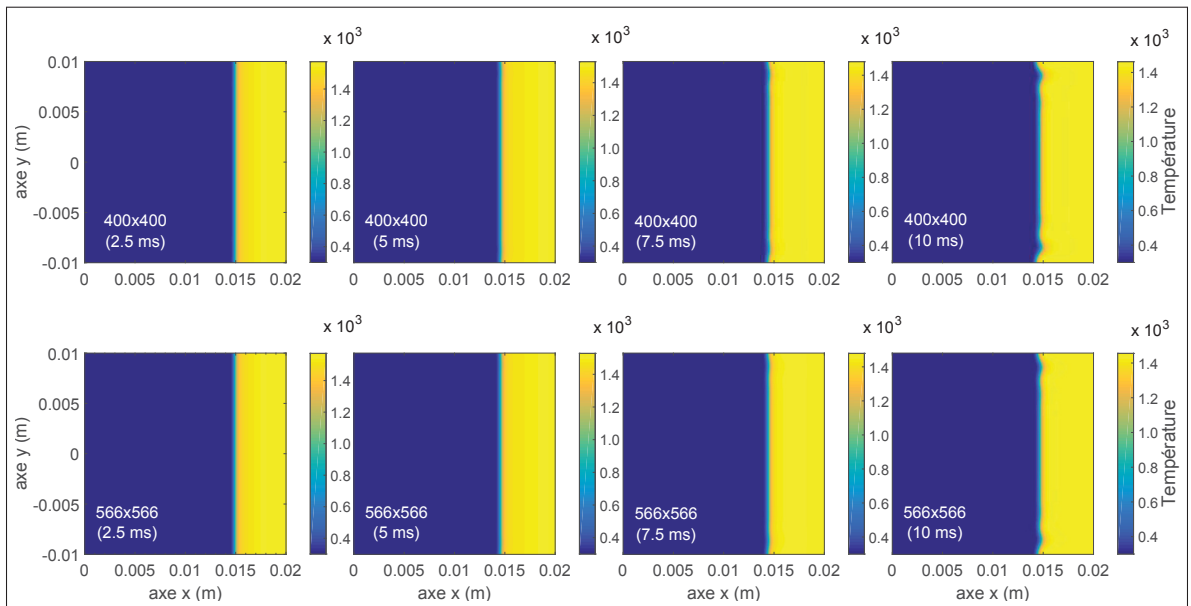


Figure 2.3 Évolution de la température au cours du temps pour le maillage 400×400 (images du haut) et le maillage 566×566 (images du bas)

Tableau 2.1 Vitesse de déplacement du front de flamme en fonction du maillage

Maillage	80k	160k	320k
Position du front de flamme à 10 ms (mm)	14,896	14,917	14,927
Vitesse de déplacement (cm/s)	1,04	0,83	0,73

un comparatif des positions des différents front de flamme à 10 ms en fonction du maillage utilisé, ainsi que les vitesses de déplacement du front de flamme associées et permet d'observer que le raffinement du maillage entraîne un déplacement du front de flamme plus faible et donc une vitesse de déplacement plus faible de celui-ci puisque les erreurs numériques diminuent avec le raffinement de maillage. Cependant, la différence de déplacement des fronts de flamme entre les maillages 284 et 400, et 400 et 566 étant de l'ordre du dixième de $\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$, on peut questionner l'utilisation d'un maillage plus raffiné que celui possédant 80 000 cellules puisque ceux-ci présentent peu de différences (un écart relatif de 0.69% (maillage 80k), 0.55% (maillage 160k) et 0.49% (maillage 320k) du front de flamme avec sa position théorique à 15 mm). Néanmoins, comme expliqué dans la revue de littérature, le phénomène de cellularité est un phénomène dépendant de l'ordre de résolution des schémas numériques et du maillage, c'est pourquoi le maillage de 160 000 cellules tel qu'utilisé par Regele *et al.* (2013) a été choisi en tant que compromis entre le temps de calcul nécessaire et maillage suffisamment raffiné.

2.3.6 Synthèse du modèle numérique

Ce chapitre a permis d'explicitier le choix du modèle numérique construit qui sera utilisé pour les études comparatives dans les chapitres suivants. Ainsi, le modèle numérique utilisé comporte les caractéristiques suivantes :

- La géométrie consiste en un carré de 0.02 m de côté et un maillage régulier comportant 160 000 cellules (maille de 5×10^{-5} m de côté).
- La discrétisation temporelle est effectuée par un schéma d'Euler implicite d'ordre 2 avec un pas de temps de 1×10^{-6} et 20 itérations par pas de temps.
- La discrétisation spatiale est effectuée selon un schéma "Upwind" du deuxième ordre.

- Le modèle converge avec des résidus inférieurs à 10^{-7} pour la quantité de mouvement et 10^{-8} pour la continuité.
- Les mécanismes de réactions de chaque cinétique chimique ainsi que les propriétés thermodynamiques et de transport des espèces associées sont importées via des fichiers Chemkin, via le modèle de combustion "Complex Chemistry".
- La réaction chimique de l'hydrogène avec l'air est amorcée en imposant une température de 300 K dans la partie du domaine contenant les réactifs et une température de 1500 K dans la partie du domaine contenant les produits. Ces deux parties du domaine étant séparées selon la condition de perturbation initiale.
- Les conditions aux limites sont les suivantes : entrée du mélange H_2/O_2 correspondant à une richesse de 0.4, à une vitesse d'entrée correspondant à la vitesse de flamme laminaire de la cinétique chimique utilisée et à une température constante. En sortie sont imposées des conditions de Dirichlet dans un premier temps (chapitre 3) puis des conditions de Neumann (chapitres 4 et 5). Les conditions aux limites latérales sont périodiques.

Enfin, afin de faciliter la compréhension du prochain chapitre portant sur l'influence de la cinétique chimique, la loi de mélange ainsi que la condition de sortie, le tableau 2.2 fournit un récapitulatif des différentes conditions initiales et aux limites qui vont être utilisées par la suite dans le chapitre 3. La section 3.1 portera sur l'influence de la cinétique chimique tandis que la section 3.3 portera sur l'influence de la loi de mélange (section 3.3.1 et section 3.3.2.1 et la condition de sortie (section 3.3.2.2).

Tableau 2.2 Récapitulatif des conditions de simulation
du chapitre 3

Chapitre 3	Section	Pression (atm)	Vitesse d'entrée (cm/s)	Condition de sortie	Perturbation initiale	Cinétique chimique
Simulation 1	3.1.1	1	19.8	Dirichlet	Cas basique	Sandia
Simulation 2	3.1.2	1	19.6	Dirichlet	Cas basique	Davis
Simulation 3	3.1.3	1	21.18	Dirichlet	Cas basique	San Diego
Simulation 4	3.1.4	1	24.69	Dirichlet	Cas basique	LLNL
Simulation 5	3.3.1	1	19.6	Dirichlet	Cas basique	Davis
Simulation 6	3.3.2.1	1	24.69	Dirichlet	Cas basique	San Diego
Simulation 7	3.3.2.2	1	24.69	Neumann	Cas basique	San Diego

CHAPITRE 3

INFLUENCE DE LA CINÉTIQUE CHIMIQUE ET DE LA LOI DE MÉLANGE

Ce chapitre porte sur l'étude de l'influence de la cinétique chimique ainsi que la loi de mélange sur le phénomène de cellularité. Dans un premier temps, quatre cinétiques chimiques (toutes des mécanismes de réaction H_2/O_2) seront étudiées avec les mêmes conditions de simulations, puis l'influence de la loi de mélange sera étudiée au travers du test d'une nouvelle loi sur deux cinétiques chimiques. Dans un dernier temps, une nouvelle condition de sortie sera testée et détaillée, ainsi que les raisons qui sont à l'origine de ce test.

3.1 Influence de la cinétique chimique

La première section de ce chapitre porte sur l'influence de la cinétique chimique sur la création et le développement du phénomène de cellularité. Au total, quatre cinétiques chimiques seront testées (dans leur ordre d'apparition : Sandia (section 3.1.1), Davis (section 3.1.2), San Diego (section 3.1.3) et LLNL (section 3.1.4)). Pour chaque cinétique chimique, le comportement de la flamme sera détaillé au travers de l'évolution de la fraction molaire de OH, tel qu'effectué dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Kadowaki *et al.* (2005b), Kishore *et al.* (2011)), et puisque ce paramètre est celui qui permet la meilleure observation du phénomène de cellularité.

Chacune des cinétiques chimiques présentée dans cette section fut testée dans les conditions exposées dans le chapitre 2, avec les spécificités suivantes : une condition de Dirichlet en sortie (température, pression et fractions molaires des espèces imposées), le front de flamme est initialisé via la fonction sinusoïdale selon l'équation 2.32 présentée dans la section 2.3.4 afin de faire apparaître les cellules, les conductivités thermiques et dynamiques des espèces $H_2/O_2/N_2/H_2O$ ont été calculées via les fonctions A I-2 et A I-3, la conductivité thermique et la viscosité dynamique du mélange ont été calculées selon la loi de mélange basée sur la fraction massique (équation 2.28) et la vitesse d'entrée du mélange correspond à la vitesse de flamme laminaire de chaque cinétique chimique qui a été calculée via Chemkin (Ouimette (2009))

pour une richesse de 0.4. Les vitesses de flamme laminaire de chaque cinétique chimique étant différentes du fait des différences au sein des mécanismes de réactions de chaque cinétique chimique et des propriétés de thermodynamiques et de transport associées. Enfin, le tableau 3.1 fournit un récapitulatif des conditions de simulations de cette section.

Tableau 3.1 Récapitulatif des conditions de simulation de la section 3.1 du chapitre 3

Chapitre 3	Section	Pression (atm)	Vitesse d'entrée (cm/s)	Condition de sortie	Perturbation initiale	Cinétique chimique
Simulation 1	3.1.1	1	19.8	Dirichlet	Cas basique	Sandia
Simulation 2	3.1.2	1	19.6	Dirichlet	Cas basique	Davis
Simulation 3	3.1.3	1	21.18	Dirichlet	Cas basique	San Diego
Simulation 4	3.1.4	1	24.69	Dirichlet	Cas basique	LLNL

3.1.1 Cinétique chimique de Sandia

La première cinétique provient du laboratoire de Sandia (Kee *et al.* (1985)) et est composée de 9 espèces ($H_2/O_2/H/O/OH/HO_2/H_2O/H_2O_2/N_2$) et de 38 réactions (annexe II.1) et sera référencée en tant que "Sandia". La vitesse de flamme laminaire correspondant à cette cinétique pour une richesse valant 0.4 est : $S_{L_{Sandia}} = 19.8 cm.s^{-1}$. La Figure 3.1 représente l'évolution de la fraction molaire de OH pour Sandia entre 2.5 et 20 ms, avec un intervalle de temps de 2.5 ms (Lecture de gauche à droite et de haut en bas).

Pendant les 2.5 premières millisecondes, le front de flamme reste plan et il n'y a aucune présence de cellularité. Cependant, à partir de 5 ms, il commence à apparaître sur le front de flamme de légères ondulations puis à partir de 7.5 ms les cellules commencent à se former, elles sont au nombre de 8. Ensuite, ces cellules vont grossir jusqu'à environ 12.5 ms, en effectuant une première fusion des cellules aux extrémités vers 10 ms, comme le montre les images n°4 et 5 (8 cellules présentes sur l'image n°4 alors qu'il y en a 6 sur l'image n°5). Puis, entre 12.5 et 15 ms, les cellules aux extrémités vont se diviser alors que les cellules centrales vont fusionner puis se diviser afin de former des plus petites cellules (passage de 6 cellules sur l'image n°6 à 8 cellules sur l'image n°7). À partir de ce moment, le front de flamme va prendre une forme concave, indiquant une propagation plus rapide des cellules aux extrémités, et les cellules vont

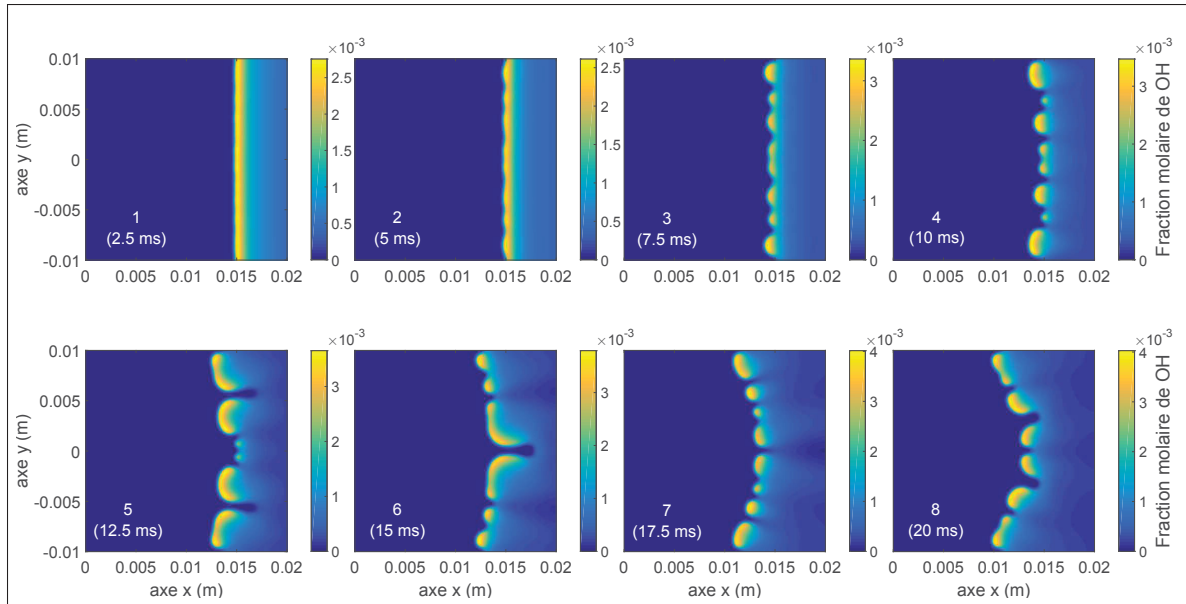


Figure 3.1 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Sandia

continuer de grossir (présence de 6 cellules sur l'image n°8) en effectuant une fusion entre 17.5 et 20 ms. Enfin, entre 6 et 8 cellules sont systématiquement présentes pour la simulation exposée, entre 2.5 et 20 ms, avec une particularité à noter : lorsque les cellules atteignent un rayon trop important (environ 2 mm pour cette cinétique) celles-ci se divisent, formant de plus petites cellules, qui vont elles-mêmes fusionner puis se rediviser, indiquant la possibilité d'un rayon critique entrainant une division de cellules. Ce phénomène de grossissement des cellules, couplé à des fusions et des divisions de cellules, est un phénomène caractéristique de la cellularité qui est retrouvable dans la littérature (Yuan *et al.* (2005), Kadowaki *et al.* (2005b), Altantzis *et al.* (2011)) avec des ordres de résolution plus élevés des schémas de discrétisation que dans ce mémoire.

De plus, la Figure 3.2 représentant la superposition des lignes de courant et de la fraction molaire de OH à $t=12.5$ ms permet de mettre en évidence l'instabilité hydrodynamique évoquée dans la section 1.3.2. Comme il est possible d'observer sur la Figure 3.2, du fait de la conservation de la composante tangentielle de la vitesse au travers du front de flamme, les lignes de courant sont déviées au passage du front de flamme, ce qui entraîne une accélération des parties

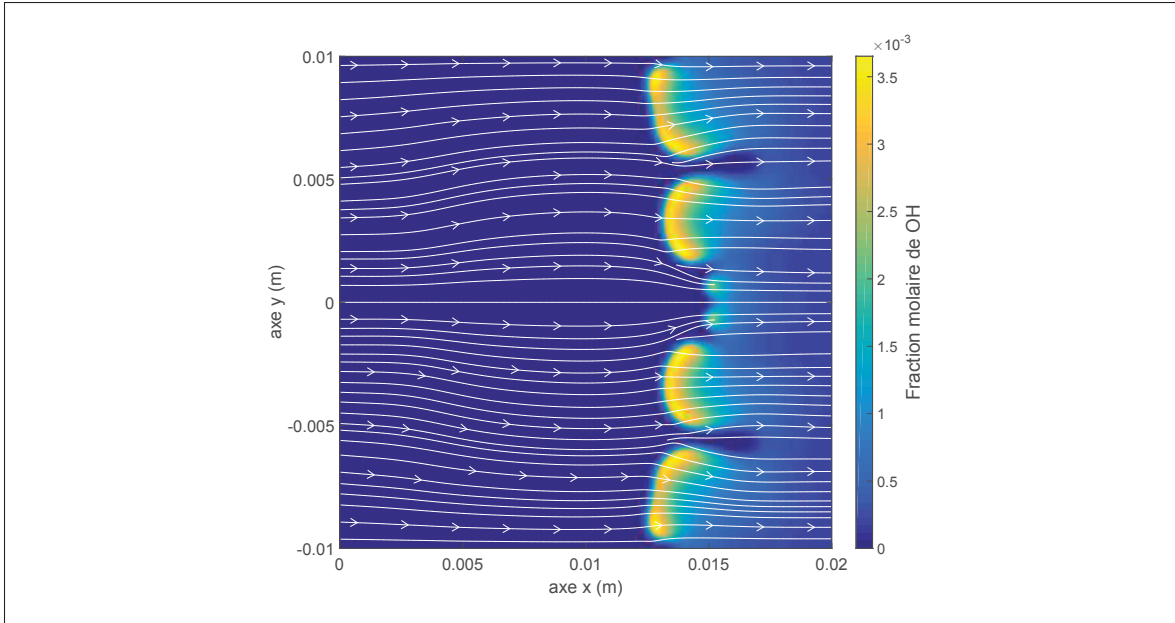


Figure 3.2 Superposition des lignes de courant et de la fraction molaire de OH pour la cinétique chimique de Sandia à $t=12.5$ ms

convexes vers les gaz frais (les cellules) et une décélération des parties concaves vers les gaz frais (les zones d'espaces entre les cellules) tel que le prédit la théorie (Law (2000)).

3.1.2 Cinétique chimique de Davis

La deuxième cinétique chimique est celle de Davis (Davis *et al.* (2005)) et est composée de 14 espèces ($H_2/H/Ar/He/O/OH/HCO/HO_2/H_2O/CO/O_2/H_2O_2/CO_2/N_2$) et de 52 réactions (annexe II.2) et sera référencée en tant que "Davis". La vitesse de flamme laminaire correspondant à cette cinétique pour une richesse valant 0.4 est : $S_{L_{Davis}} = 19.6 cm.s^{-1}$. L'évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Davis est présentée sur la Figure 3.3.

Pour la cinétique chimique de Davis, l'évolution de la flamme est proche de celle de Sandia : pendant les 2.5 premières millisecondes, la flamme reste plane et de légers plissements de la flamme apparaissent à partir de 5 ms. Ensuite, vers 7.5 ms, les premières cellules apparaissent, à la différence de la cinétique chimique de Sandia, elles sont au nombre de 7. Ensuite, la flamme

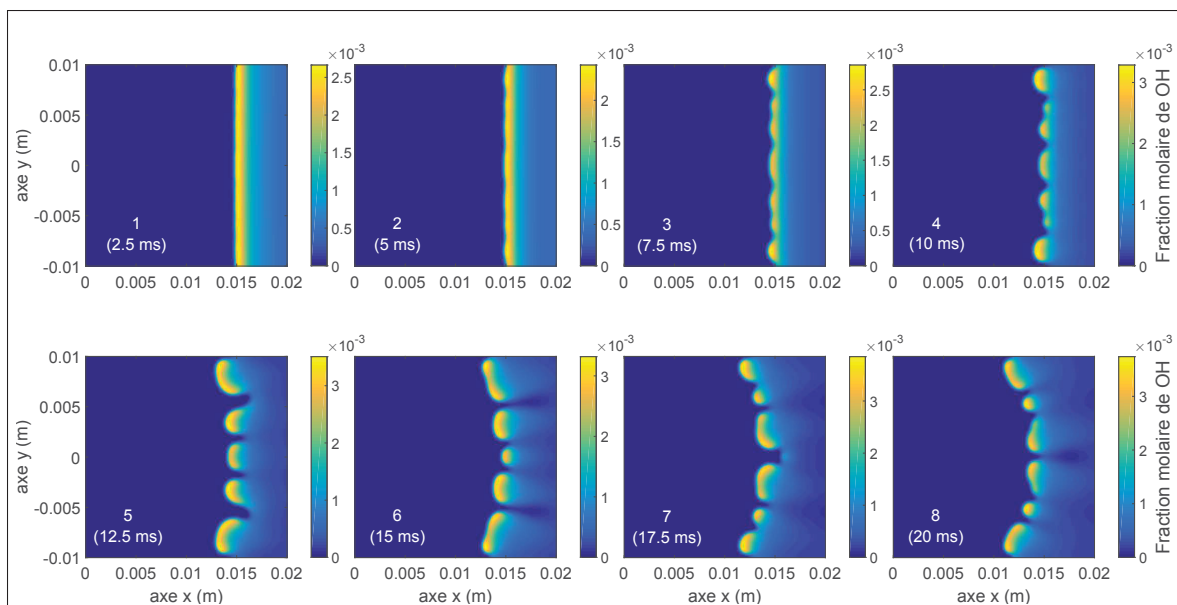


Figure 3.3 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Davis

suit le même développement que la cinétique de Sandia : les cellules grossissent jusqu'à 15 ms en atteignant un rayon maximum d'environ 2.2 mm tout en effectuant une première fusion de cellules vers 10 ms. Entre 15 ms et 17.5 ms on observe une première division des cellules aux extrémités ainsi que la fusion de la cellule centrale avec ses cellules avoisinantes. Entre 17.5 ms et 20 ms une division semble s'être effectuée pour les cellules centrales mais également une fusion pour les cellules aux extrémités. Tout comme la cinétique chimique de Sandia, le front de flamme commence à prendre une forme concave vers les gaz frais à partir de 15 ms, indiquant une propagation plus rapide des cellules situées aux extrémités.

Bien que la cinétique chimique de Davis suit le même schéma d'évolution de flamme que la cinétique chimique de Sandia, elle se différencie de celle-ci par la taille de ses cellules qui est légèrement supérieure ainsi que son nombre de cellules qui est plus faible.

3.1.3 Cinétique chimique de San Diego

La troisième cinétique chimique provient de l'Université de Californie à San Diego (UCSD (2016)) et est composée de 14 espèces ($Ar/He/H/O_2/OH/O/H_2/H_2O/HO_2/H_2O_2/CO/CO_2/C_2H_6/N_2$) et de 46 réactions (annexe II.3) et sera référencée en tant que "San Diego". La vitesse de flamme laminaire correspondant à cette cinétique pour une richesse valant 0.4 est : $S_{L_{SanDiego}} = 24.69 cm.s^{-1}$. La Figure 3.4 représente l'évolution de la fraction molaire d'OH au cours du temps pour San Diego.

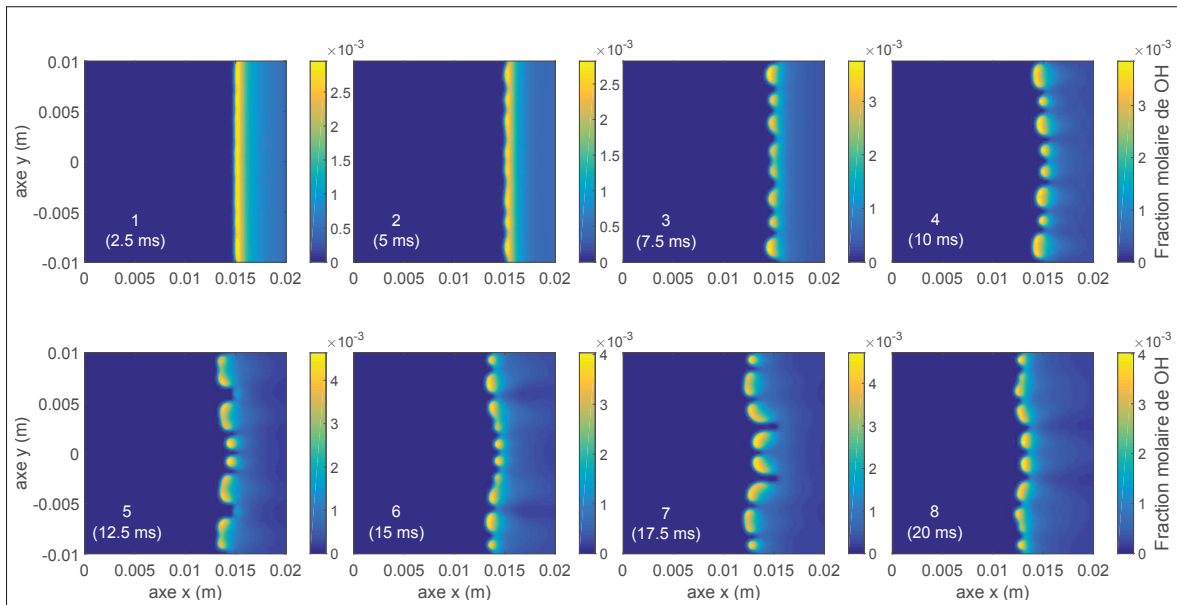


Figure 3.4 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego

Comme pour les autres cinétiques chimiques, l'apparition de la cellularité pour la cinétique de San Diego commence après 5 ms, avec la particularité ici que les ondulations présentes à 5 ms semblent plus prononcées que pour les autres cinétiques chimiques, indiquant un développement de la cellularité potentiellement plus rapide par rapport aux autres cinétiques chimiques. Tout comme pour les autres cinétiques chimiques une première fusion des cellules aux extrémités avec leurs cellules avoisinantes a lieu vers 10 ms. Cependant, à l'opposé de la cinétique chimique de Davis, la première division de cellules n'a pas lieu vers entre 15 et 17.5 ms mais

entre 12.5 et 15 ms : faisant passer le nombre de cellules de 6 à 12.5 ms à 8 à 15 ms. Entre 15 et 20 ms, comme pour les autres cinétiques chimiques, les cellules vont fusionner puis se diviser.

Cependant, la cinétique de San Diego se différencie des autres cinétiques chimiques d'abord par la taille de ses cellules qui est légèrement plus faible que celle des autres (un maximum d'environ 1.5 mm est atteint vers 12.5 ms contre environ 2 et 2.2 mm pour Sandia et Davis), son nombre de cellules qui oscille entre 8 et 10 cellules ainsi que son front de flamme qui possède une forme concave quasi absente par rapport aux autres cinétiques chimiques.

3.1.4 Cinétique chimique de LLNL

La quatrième et dernière cinétique chimique provient du laboratoire national de Lawrence Livermore (Connaire *et al.* (2004)) et est composée de 10 espèces ($H/H_2/O/O_2/OH/H_2O/HO_2/H_2O_2/Ar/N_2$) et de 42 réactions (annexe II.4) et sera référencée en tant que "LLNL". La vitesse de flamme laminaire correspondant à cette cinétique pour une richesse valant 0.4 est : $S_{LLNL} = 21.18 cm.s^{-1}$. L'évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de LLNL est présentée sur la Figure 3.5.

L'évolution de la cellularité pour cette cinétique chimique est très ressemblante à celle de Sandia : 8 cellules apparaissent à partir de 7.5 ms, celles-ci vont alors grossir jusqu'à 12.5 ms. Entre 12.5 et 15 ms, les cellules aux extrémités vont se diviser alors que les cellules centrales vont commencer à fusionner (elles atteignent un rayon d'environ 2.4 mm) puis se diviseront entre 15 et 17.5 ms. Puis, entre 17.5 et 20 ms, le front de flamme prend une forme concave vers les gaz frais, mais cependant moins marquée que pour la cinétique de Sandia. La différence majeure entre les deux cinétiques se trouve dans l'intervalle de temps 17.5-20 ms où les cellules centrales de LLNL semblent décroître alors que les cellules centrales de Sandia semblent quant-à-elles croître.

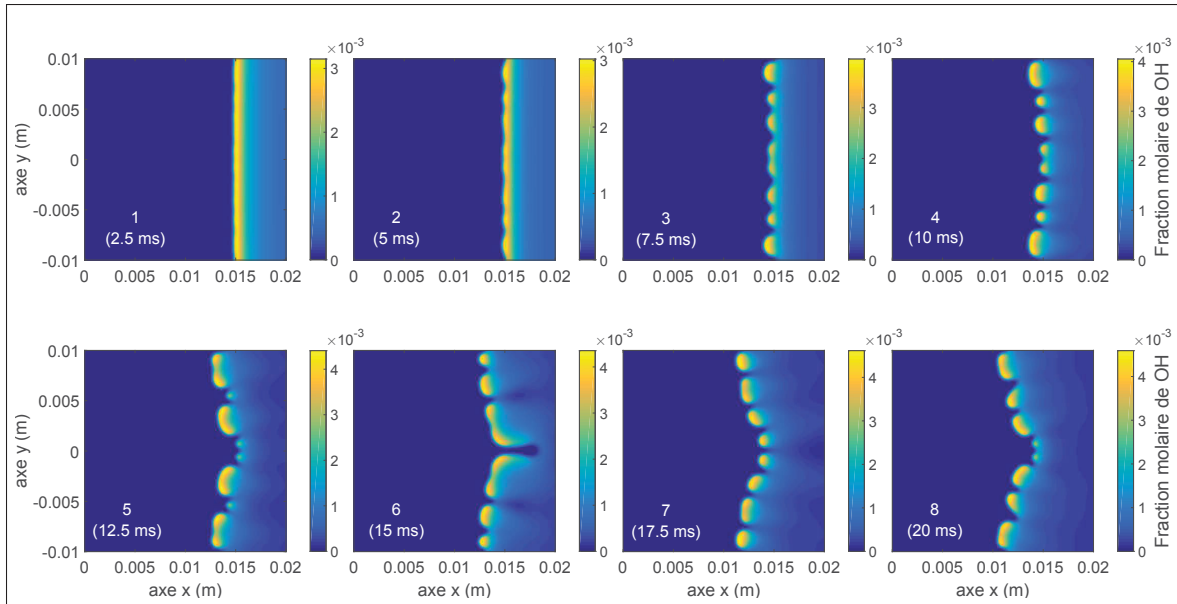


Figure 3.5 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de LLNL

Dans toutes les cinétiques chimiques présentées, l'évolution de la cellularité et du front de flamme suit le même schéma global :

- Premièrement, le front de flamme reste plan jusqu'à environ 2.5 ms.
- De légères ondulations naissent vers 5 ms.
- Ensuite, la cellularité commence à apparaître vers 7.5 ms, le nombre de cellules variant entre 5 et 8 selon la cinétique utilisée.
- Les cellules vont alors grossir, le phénomène de fusion puis division des cellules apparaît ainsi que la courbure du front de flamme (plus ou moins marquée selon la cinétique utilisée) indiquant une propagation plus rapide des extrémités.

Ce schéma d'évolution du front de flamme et de la cellularité est similaire à la littérature (Yuan *et al.* (2005), Yu (2013), Kadowaki *et al.* (2005b)). Cependant, les différences entre les tailles de cellules, leur nombre, et leur vitesse d'évolution peuvent provenir de plusieurs facteurs :

- Le premier facteur possible étant les propriétés thermodynamiques et de transport qui sont spécifiques à chaque cinétique chimique. Afin de quantifier l'impact des propriétés thermodynamiques et de transport, la cinétique chimique de LLNL fut testée avec les fichiers de

transport et de thermodynamique de la cinétique chimique de San Diego. Cependant, les résultats obtenus (annexe III.1) indiquèrent un effet relativement faible de ces propriétés sur le comportement de la flamme.

- Le deuxième facteur possible étant les équations de réactions chimiques et leur coefficients d'Arrhenius qui diffèrent en fonction de la cinétique utilisée. En effet, le modèle de chimie utilisé se basant sur l'équation d'Arrhenius afin de calculer les taux de réactions des espèces présentes, et puisqu'il y a des différences entre les coefficients d'Arrhenius selon la cinétique chimique utilisée, ceci peut avoir des conséquences sur le comportement de la flamme également. L'équation d'Arrhenius étant définie de la manière suivante :

$$R_j = -A_j T^{\beta_j} \prod_{\text{tout réactif}} \left(\frac{\rho Y_i}{M_i} \right)^{p_{ij}} e^{\frac{-E_{aj}}{R_u T}} \quad (3.1)$$

Avec R_j le taux de réaction de l'espèce j et A_j , B_j et E_{aj} le facteur pré-exponentiel, l'exposant de la température, l'énergie d'activation pour la j -ième réaction, et respectivement R_u la constante des gaz parfait et p_{ij} les exposants de l'espèce i . Tous ces paramètres provenant du fichier Chemkin contenant le mécanisme de réaction.

3.2 Comparaison des cinétiques chimiques

La fraction molaire de OH n'étant pas un paramètre suffisant pour quantifier pleinement les différences entre les cinétiques chimiques utilisées, d'autres paramètres tels que le nombre de cellules, le taux de déformation maximal et le dégagement de chaleur maximal de chaque cinétique vont être étudiés.

3.2.1 Nombre de cellules

Un des premiers paramètres de comparaison des différentes cinétiques chimiques étudié est le nombre total de cellules comme effectué dans la littérature (Kadowaki *et al.* (2005b), Yuan *et al.* (2007)). L'évolution du total nombre de cellules de chaque cinétique au cours du temps est représentée sur la Figure 3.6. Chaque cinétique chimique suit le même schéma d'évolution,

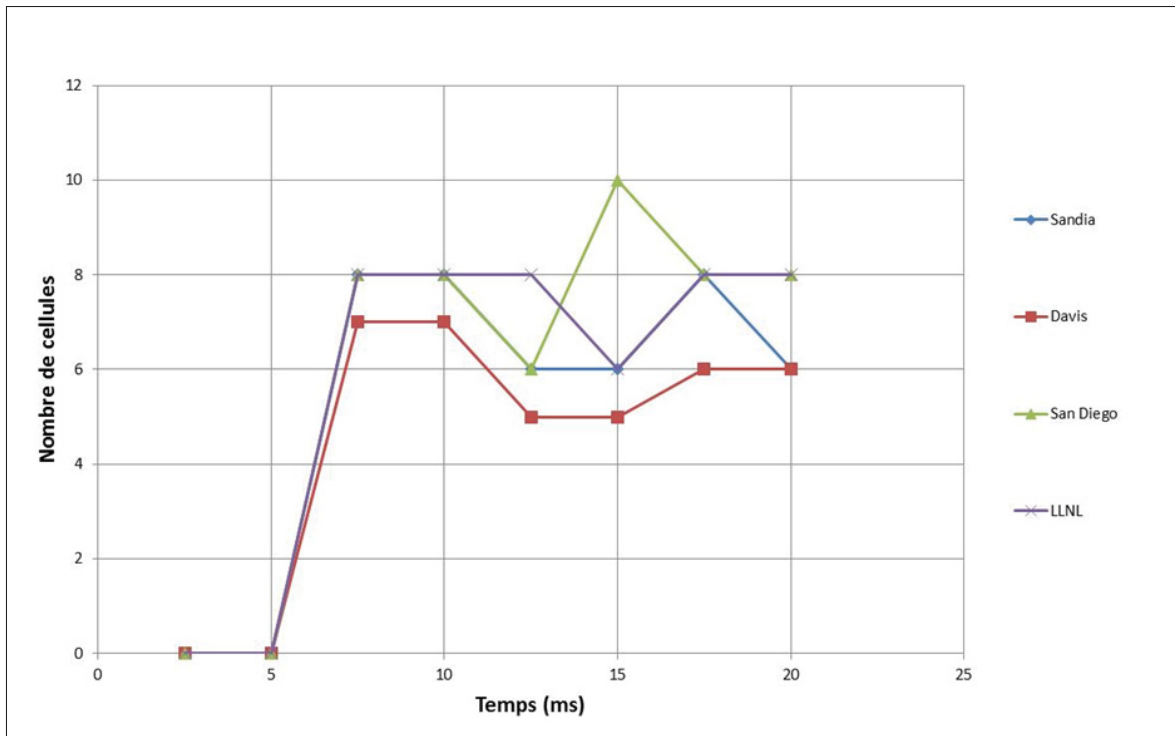


Figure 3.6 Nombre de cellules au cours du temps pour chaque cinétique chimique

un schéma cyclique, vis-à-vis de son nombre de cellules : les cellules n'apparaissent qu'à partir de 7.5 ms, puis une première fusion de cellules a lieu entre 10 et 12.5 ms pour les cinétiques de Davis/Sandia/San Diego alors que pour LLNL elle a lieu à entre 12.5 et 15 ms. Ensuite, une division de cellules a lieu entre 15 et 17.5 ms pour Davis/Sandia/LLNL alors qu'elle a lieu à entre 12.5 et 15 ms pour San Diego. Le nombre de cellules de la cinétique chimique de Sandia/Davis/San Diego et LLNL oscille respectivement entre 6-8/5-7/6-10/6-8 et 6-8 et provient du fait que la cellularité est un phénomène qui se caractérise par ses fusions et divisions de cellules (Yuan *et al.* (2005), Kadowaki *et al.* (2005b)) donc un nombre oscillant de cellules.

3.2.2 Taux de déformation

Dans une optique de mise en relation du phénomène de fusion/division de cellules ainsi le nombre total de cellules, le taux de déformation va être examiné. Le taux de déformation (dans

le plan xy) est défini de la manière suivante :

$$\epsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (3.2)$$

Où u et v sont respectivement les composantes selon l'axe x et l'axe y de la vitesse. La Figure 3.7 représente l'évolution du taux de déformation maximal de chaque cinétique chimique au cours du temps. Comme observé sur la Figure 3.7 le taux de déformation maximal de chaque cinétique chimique suit la même évolution au cours du temps : il croît de 2.5 ms à 12.5 ms où un premier maximum est atteint, puis va chuter jusqu'à 15 ms, pouvant indiquer le phénomène de fusion des cellules comme nous l'avons vu pour chaque cinétique chimique dans les sections précédentes. Ensuite, le taux de déformation maximal va atteindre un nouveau pic (sauf pour Sandia dont le taux de déformation maximal va continuer de croître) indiquant une fusion imminente des cellules.

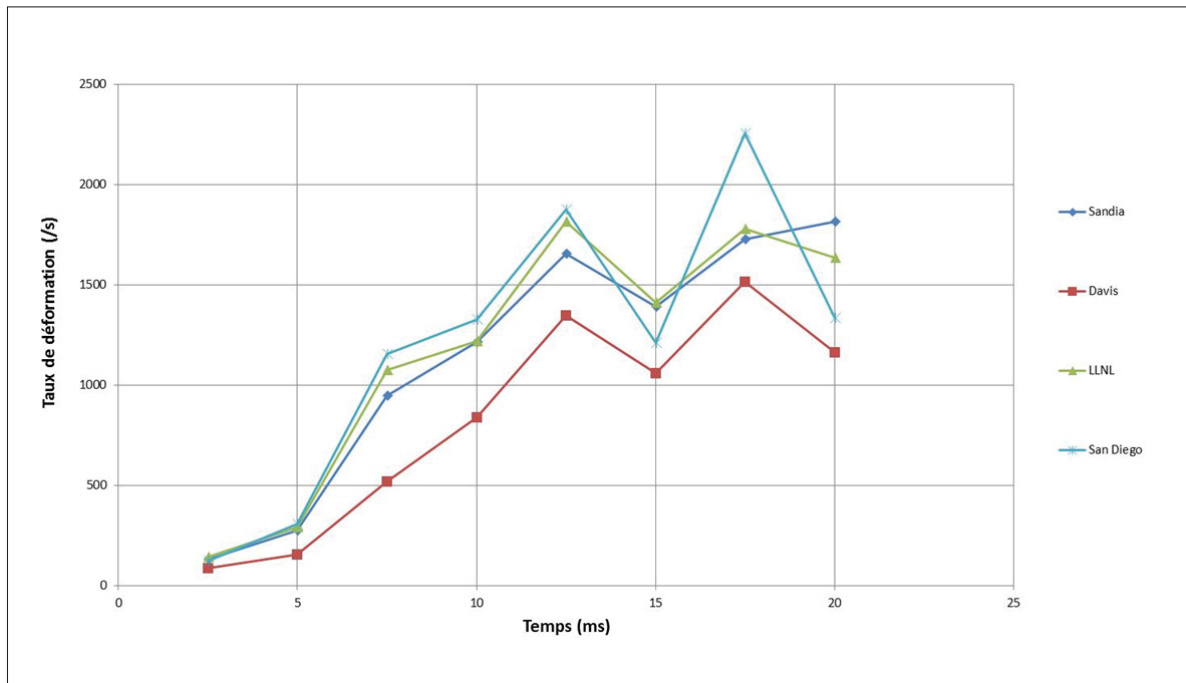


Figure 3.7 Taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cinétique chimique

De plus, le taux de déformation des cinétiques de Sandia/San Diego et LLNL est en moyenne 50% plus élevé que celui de la cinétique de Davis ainsi que le deuxième pic du taux de déformation de San Diego qui est en moyenne 20% plus élevé (environ 40% par rapport à Davis). Ainsi, il est possible d'émettre l'hypothèse que plus une chimie possède de cellules, plus elle sera soumise à des déformations importantes et donc soumise à plus de fusion/division de cellules, de même que les pics du taux de déformation observés sur la Figure 3.7 semblent corrélés avec les phénomènes de fusions/divisions de cellules.

3.2.3 Dégagement de chaleur et fraction molaire de OH

Comme effectué dans la littérature (Yu (2013)), le dégagement de chaleur va être étudié afin de fournir des éléments de comparaison. Le dégagement de chaleur est calculé de la manière suivante :

$$Q_r = \sum_{i=1}^N \left(\omega_i H_{f,i}^0 \right) \quad (3.3)$$

Où ω_i est le taux de réaction de l'espèce i , $H_{f,i}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce i et N le nombre total d'espèces. Les Figures 3.8 et 3.9 représentent respectivement l'évolution du taux de dégagement maximal de chaleur et de la fraction molaire maximale de OH au cours du temps de chaque cinétique chimique.

Une première observation rapide des Figures 3.8 et 3.9 nous permet d'admettre que la fraction molaire maximale de OH et le taux de dégagement de chaleur maximal évoluent de manière similaire : ainsi, lorsque la fraction molaire maximale de OH croît, le taux de dégagement de chaleur maximal croît, et inversement. Ceci paraît cohérent vis-à-vis de la définition du taux de dégagement de chaleur (équation 3.3). Cependant, ces deux paramètres évoluent de manière différente selon la cinétique chimique : pour San Diego et Davis, ceux-ci sont marqués par des pics à 12.5 ms et 17.5 ms, démontrant une forte corrélation entre la fraction molaire de OH et le taux de dégagement de chaleur pour ces deux cinétiques. Pour LLNL ces pics sont moins marqués pour la fraction molaire de OH, ce qui se traduit par une croissance presque

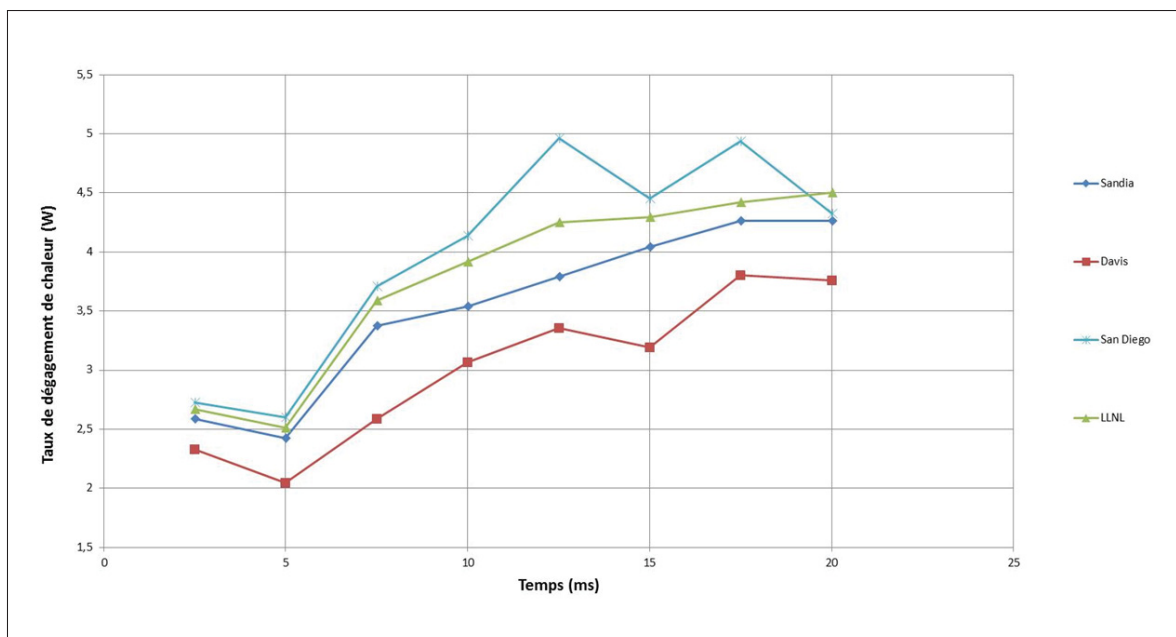


Figure 3.8 Taux de dégagement de chaleur maximal au cours du temps pour chaque cinétique chimique

continue de leur dégagement de chaleur maximal. La cinétique chimique de Sandia quant-à-elle se caractérise par une croissance continue de ces deux paramètres après 5 ms.

Les différences de l'évolution de la fraction molaire maximale de OH et du taux de dégagement maximal de chaleur entre les cinétiques chimiques peut provenir des mécanismes de réactions chimiques de chaque cinétique ainsi que leur coefficient d'Arrhenius associés qui peuvent favoriser la production de l'espèce OH selon le mécanisme de réaction, pouvant expliquer les divergences observées sur les Figures 3.8 et 3.9. De plus, en observant les valeurs maximales du taux de dégagement de chaleur de San Diego et Davis sur la Figure 3.8 il est possible d'émettre l'hypothèse qu'un nombre plus important de cellules entraîne un dégagement de chaleur plus élevé.

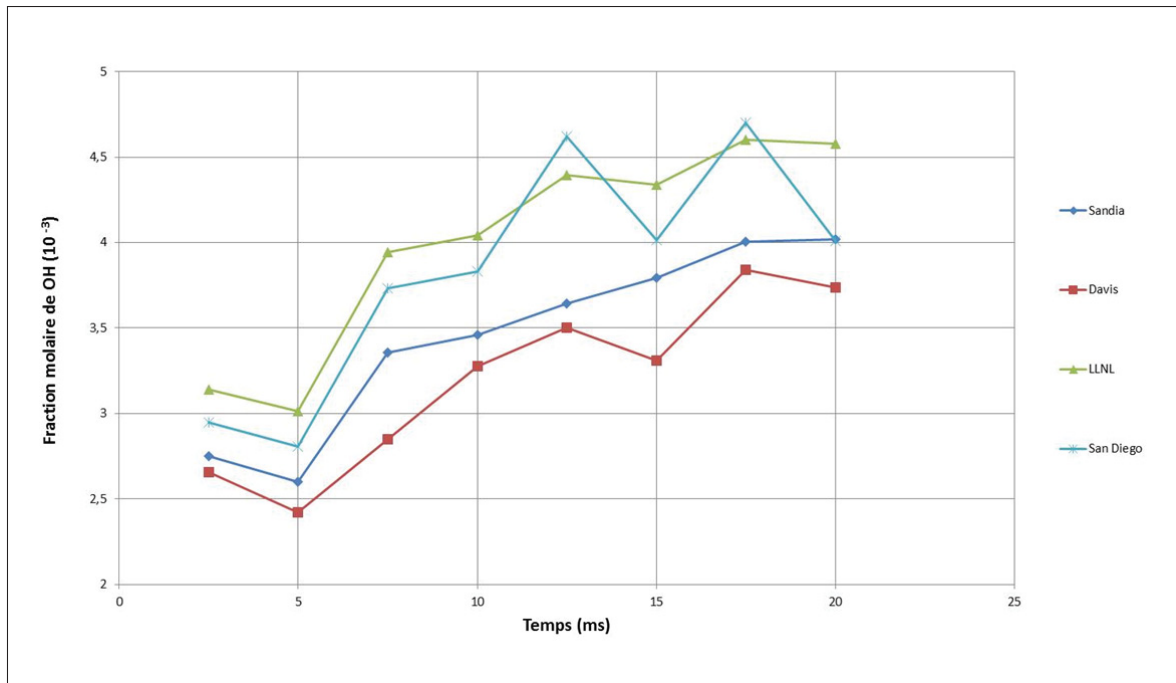


Figure 3.9 Fraction molaire maximale de OH au cours du temps pour chaque cinétique chimique

3.3 Influence de la loi de mélange

Chacune des cinétiques chimiques ayant été comparée aux autres au travers de différents paramètres tels que le nombre de cellules, le taux de déformation maximal ou encore le taux de dégagement de chaleur maximal, l'influence d'un nouveau paramètre va être étudié dans la prochaine section : la loi de mélange. Comme rappelé dans l'introduction du chapitre 3, la loi de mélange utilisée pour déterminer la conductivité thermique et la viscosité dynamique du mélange dans ce chapitre 3 est une loi de mélange se basant sur la fraction massique (équation 2.28), or cette loi n'est pas la plus adaptée lorsque des gaz possédant une masse volumique relativement faible sont utilisés en tant que combustibles, dans notre cas H_2 . Ainsi, une nouvelle loi de mélange a été testée, il s'agit de la loi de mélange "Mathur-Saxena" (équation 2.29), qui est plus adaptée du fait qu'elle se base sur la fraction molaire et non massique. Cette loi de mélange va être testée sur la cinétique chimique de Davis (section 3.3.1) et de San Diego (section 3.3.2). Ces deux cinétiques chimiques ont été choisies du fait que la cinétique chimique de Davis est utilisée dans la littérature (Regele *et al.* (2013)) et celle de San Diego présentait

un temps de calcul légèrement plus court que les autres cinétiques chimiques. La cinétique chimique de San Diego sera testée avec deux conditions de sortie différentes : la première identique à celle de Davis (condition de Dirichlet, section 3.3.2.1) puis une nouvelle condition de sortie sera testée (condition de Neumann, section 3.3.2.2), la raison de ce changement de condition de sortie sera détaillée dans la section 3.3.2.2). Afin de faciliter la compréhension des sections qui vont suivre, le tableau 3.2 récapitule les conditions dans lesquelles les prochaines simulations ont été effectuées.

Tableau 3.2 Récapitulatif des conditions de simulation de la section 3.3 du chapitre 3

Section	Chimie utilisée	Loi de mélange utilisée	Condition de sortie
3.3.1	Davis	Mathur-Saxena	Dirichlet
3.3.2.1	San Diego	Mathur-Saxena	Dirichlet
3.3.2.2	San Diego	Mathur-Saxena	Neumann

3.3.1 Test de la nouvelle loi de mélange sur Davis

La première cinétique chimique testée avec la loi de mélange "Mathur-Saxena" est celle de Davis, que nous référencerons en tant que "Davis Mathur" afin de faciliter la compréhension. La Figure 3.10 représente l'évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour cette cinétique.

L'évolution de la fraction molaire pour les dix premières millisecondes entre Davis (Figure 3.3) et Davis Mathur (Figure 3.10) ne présente pas de différences majeures si ce n'est que le phénomène de cellularité n'apparaît distinctement non plus vers 7.5 ms mais vers 10 ms. Cependant, entre 10 ms et 20 ms, l'évolution des deux flammes n'est plus la même. Tout d'abord au niveau du nombre de cellules qui oscillait entre 5 et 6 pour Davis alors que pour Davis Mathur celui-ci oscille entre 3 et 6. De plus, la taille des cellules de Davis Mathur est légèrement plus importante que celle de Davis, notamment à 17.5 ms où elles atteignent un rayon maximum d'environ 3.5 mm contre environ 2 mm pour Davis. L'évolution du front de flamme est différente également : pour Davis les cellules centrales avaient tendance à reculer

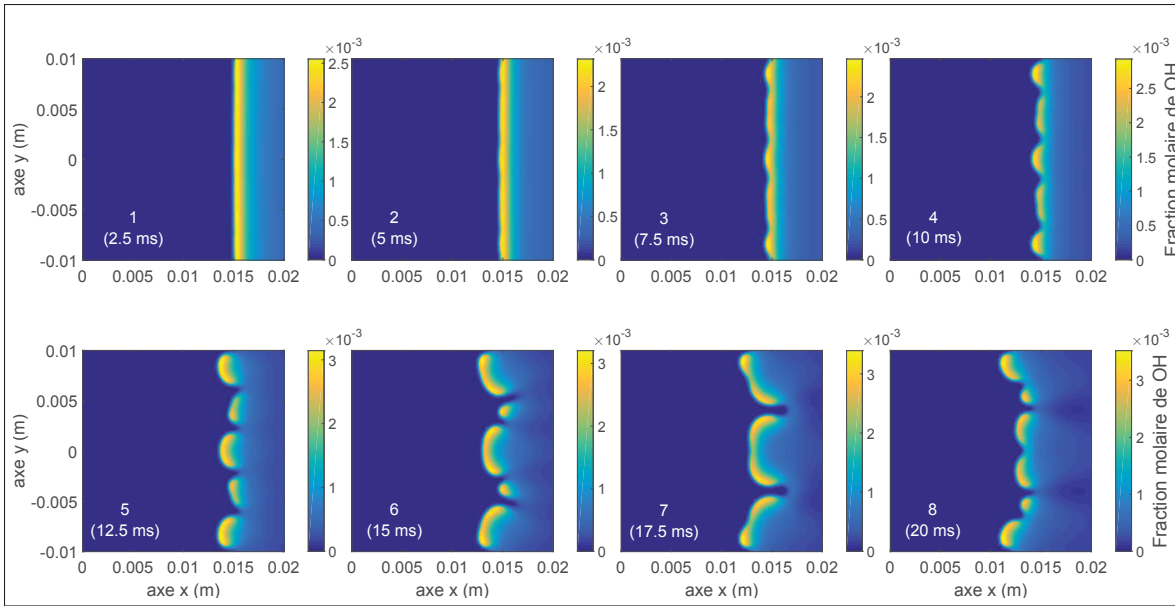


Figure 3.10 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de Davis avec la loi de mélange Mathur-Saxena

vers les gaz brûlés alors que les cellules centrales de Davis Mathur ont tendance à avancer vers les gaz frais, se traduisant par une consommation de réactifs plus importante qui les auto-accélèrent vers les gaz frais.

Comme nous venons de le voir, le changement de loi de mélange a un impact élevé sur la cellularité et le comportement de la flamme en général : ce changement peut être attribué au fait que la loi de mélange massique (équation 2.28) a tendance à sous-estimer la conductivité thermique et à surestimer la viscosité dynamique du mélange des gaz frais (environ 30% pour la conductivité thermique comme présenté sur le tableau 3.3 et environ 10% pour la viscosité dynamique comme présenté sur le tableau 3.4) par rapport à la loi de mélange Mathur-Saxena (équation 2.29). Or, la conductivité thermique du mélange étant un des paramètres afin de calculer le nombre de Lewis ($Le = \frac{k}{\rho C_p} \frac{1}{D}$) une augmentation de ce paramètre augmente le nombre de Lewis et donc peut affecter le comportement de la flamme puisque celui-ci est majoritairement dicté par le nombre de Lewis. Ces résultats concordent avec ceux de Kadowaki

et al. (2005b) sur le fait que la taille moyenne des cellules augmente avec le nombre de Lewis, ce que l'on observe entre les Figures 3.3 et 3.10.

Tableau 3.3 Conductivité thermique du mélange frais pour Davis à $t=7.5$ ms ("Davis 075") et à $t=15$ ms ("Davis 15") en fonction de la loi de mélange

	Loi de fraction massique		Loi Mathur-Saxena	
$k_{gazfrais}$ (10^{-2} W·m $^{-1}$ ·K $^{-1}$)	Davis 075	Davis 15	Davis 075	Davis 15
	2,80	2,79	3,88	3,82

Tableau 3.4 Viscosité dynamique du mélange frais pour Davis à $t=7.5$ ms ("Davis 075") et à $t=15$ ms ("Davis 15") en fonction de la loi de mélange

	Loi de fraction massique		Loi Mathur-Saxena	
$\mu_{gazfrais}$ (10^{-5} Pa·s)	Davis 075	Davis 15	Davis 075	Davis 15
	1,85	1,85	1,67	1,67

3.3.2 Test de la nouvelle loi de mélange sur San Diego

La cinétique chimique de Davis avec la loi de mélange de Mathur-Saxena ayant été étudiée et comparée avec la loi de mélange massique, la cinétique chimique de San Diego avec la loi de mélange de Mathur-Saxena va être étudiée dans le but d'obtenir des éléments de comparaison. La cinétique chimique de San Diego va donc être testée avec la loi de mélange Mathur-Saxena avec deux conditions de sortie différentes : la première que nous référencerons en tant que "San Diego Dirichlet" qui sera simulée avec les mêmes conditions de sortie que les cinétiques chimiques du chapitre 3 (conditions de Dirichlet) avec la loi de mélange "Mathur-Saxena", et la deuxième que nous référencerons en tant que "San Diego Neumann" qui sera simulée avec la loi de mélange Mathur-Saxena mais avec des conditions en sortie de type Neumann (zéro gradients). Ce test de changement de condition de sortie est conditionné par le fait qu'à haute pression, les conditions de Dirichlet ne semblent pas physiquement adaptées pour simuler correctement la combustion et que la présence d'une onde de pression en amont du front

de flamme semblait ralentir le développement de celle-ci, ainsi plusieurs auteurs préconisent plutôt l'utilisation de conditions de Neumann en sortie (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011)).

3.3.2.1 Conditions de Dirichlet

Dans un premier temps, la cinétique chimique de San Diego fut testée avec la loi de mélange Mathur-Saxena avec la condition de sortie de Dirichlet, que nous référencerons en tant que "San Diego Dirichlet" afin de faciliter la lecture. La Figure 3.11 représente l'évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour San Diego Dirichlet.

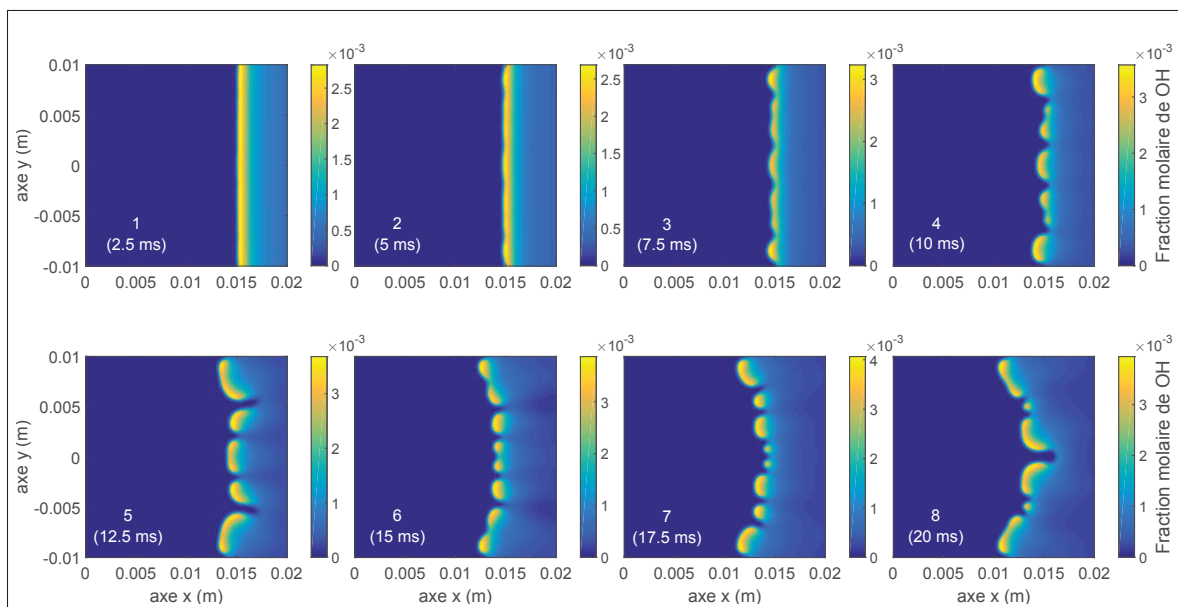


Figure 3.11 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego avec la loi de mélange Mathur-Saxena

Le même constat est effectué pour San Diego et San Diego Dirichlet que dans la section 3.3.1 : le nombre de cellules diminue avec la nouvelle loi de mélange, ainsi que la taille moyenne des cellules qui augmente, avec la particularité ici que le front de flamme de San Diego Dirichlet (Figure 3.11) est beaucoup plus marqué de manière concave vers les gaz frais que ne l'est San Diego (Figure 3.4). Tout comme dans la section 3.3.1, la loi de mélange massique a tendance

à sous-évaluer la conductivité thermique et surestimer la viscosité dynamique du mélange ici aussi : environ 30% pour la conductivité thermique comme présenté sur le tableau 3.5 et environ 10% pour la viscosité dynamique comme présenté sur le tableau 3.6, comme pour Davis Mathur.

La cinétique chimique de San Diego avec la loi de mélange Mathur-Saxena et la condition de sortie de Dirichlet ayant été étudiée, cette même cinétique chimique va maintenant être analysée avec la même loi de mélange mais avec une condition de sortie de Neumann.

Tableau 3.5 Conductivité thermique du mélange frais pour San Diego à $t=7.5$ ms ("San Diego 075") et à $t=15$ ms ("San Diego 15") en fonction de la loi de mélange

	Loi de fraction massique		Loi Mathur-Saxena	
$k_{gaz,frais}$ (10^{-2} W·m $^{-1}$ ·K $^{-1}$)	San Diego 075	San Diego 15	San Diego 075	San Diego 15
	2,79	2,80	3,85	3,86

Tableau 3.6 Viscosité dynamique du mélange frais pour San Diego à $t=7.5$ ms ("San Diego 075") et à $t=15$ ms ("San Diego 15") en fonction de la loi de mélange

	Loi de fraction massique		Loi Mathur-Saxena	
$\mu_{gaz,frais}$ (10^{-5} Pa·s)	San Diego 075	San Diego 15	San Diego 075	San Diego 15
	1,85	1,85	1,67	1,67

3.3.2.2 Conditions de Neumann

La cinétique chimique de San Diego fut également testée avec une condition de sortie de Neumann pour les raisons expliquées dans la section 3.3.2. L'évolution de la flamme ne présentant aucune différence significative entre les conditions de sortie de Dirichlet et de Neumann entre 2.5 et 10 ms, ces résultats ne seront pas présentés ici mais sont disponibles en annexe (annexe III.2). Seul les résultats entre 12.5 et 20 ms sont présentés sur la Figure 3.12. Les images du

haut (lecture de gauche à droite) représente l'évolution de la fraction molaire de OH pour San Diego Dirichlet et celles du bas la fraction molaire de San Diego Neumann.

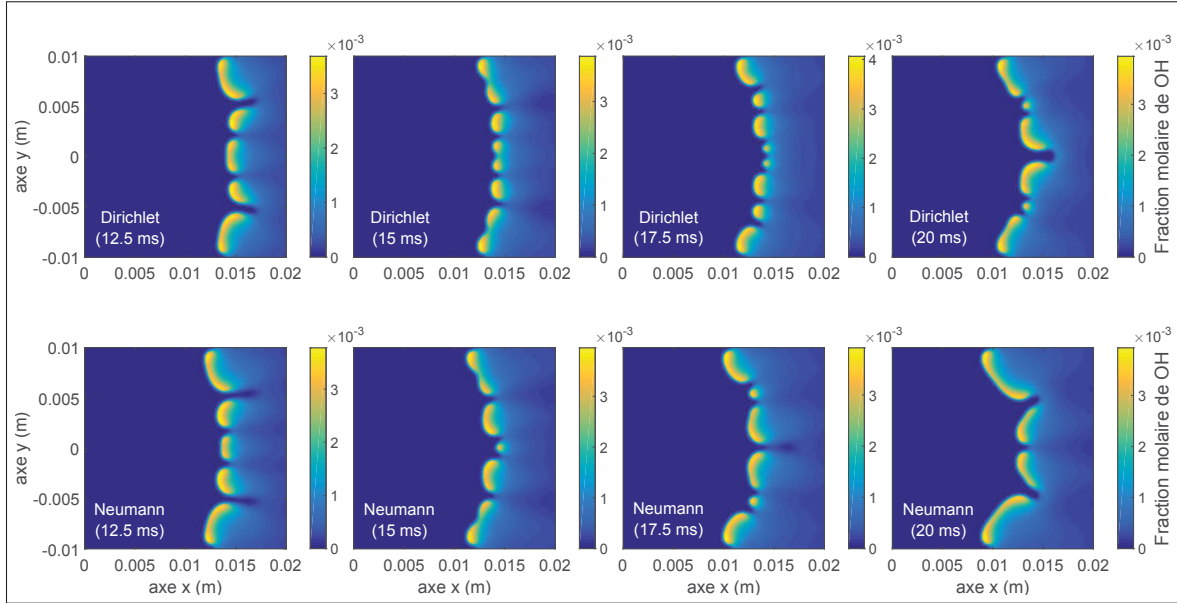


Figure 3.12 Évolution de la fraction molaire de OH entre 12.5 et 20 ms pour la cinétique chimique de San Diego avec la condition de sortie de Dirichlet (images du haut) et de Neumann (images du bas)

Les deux conditions de sortie ne semblent pas présenter de différences majeures, si ce n'est que San Diego Neumann semble se propager plus vite que San Diego Dirichlet (l'image n° 3 de San Diego Neumann est très similaire à l'image n° 4 de San Diego Neumann) que l'on peut attribuer à la dissipation plus rapide de l'onde de pression avec la condition de Neumann. De plus, la condition de sortie de Neumann permet d'obtenir des résidus plus faibles que la condition de sortie de Dirichlet : les résidus de la continuité, du moment en X et du moment en Y sont environ trois fois plus faible pour la condition de Neumann que celle de Dirichlet. Enfin, la condition de Neumann semble plus utilisée dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011)). Ainsi, la condition de Neumann sera donc utilisée dans le reste de ce mémoire (chapitres 4 et 5) pour les raisons qui viennent d'être présentées. Enfin, la cinétique chimique de San Diego présentant le temps de calcul le plus court parmi Davis et LLNL, et du fait que

Sandia soit jugée trop incomplète par rapport aux autres mécanismes de réaction, San Diego sera la cinétique chimique utilisée dans tout le reste de ce mémoire.

3.4 Conclusion du chapitre

L'influence de trois paramètres sur la cellularité furent testés dans ce chapitre : la cinétique chimique utilisée, la loi de mélange et la condition de sortie. Nous allons effectuer un résumé de l'influence de chaque paramètre, dans leur ordre d'étude.

Comme nous avons pu l'observer dans les sections 3.1.1, 3.1.2, 3.1.3 et 3.1.4, la cinétique chimique utilisée a un impact important sur le comportement de la flamme. Bien que chaque cinétique semble suivre une évolution cyclique vis-à-vis de certains paramètres tels que le taux de déformation maximal, la fraction molaire maximale de OH et le taux de dégagement de chaleur maximal (évolution cyclique pouvant correspondre au phénomène de fusion/division des cellules que l'on retrouve dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Yuan *et al.* (2005))) des différences demeurent entre les cinétiques (nombre de cellules, forme du front de flamme, etc.). Ces différences peuvent s'expliquer par le nombre de réactions chimiques des cinétiques chimiques des espèces, ainsi que les coefficients d'Arrhenius : en effet, le modèle de chimie utilisé se basant sur l'équation d'Arrhenius afin de calculer les taux de réaction des espèces présentes, et puisqu'il y a des différences entre les coefficients d'Arrhenius selon la cinétique chimique utilisée, ceci peut avoir des conséquences sur le comportement de la flamme également.

L'impact de la loi de mélange fut testée dans la section 3.3 : au lieu d'utiliser une loi de mélange se basant sur la fraction massique (équation 2.28) une loi de mélange se basant sur la fraction molaire fut utilisée (équation 2.29). L'impact conséquent de cette loi de mélange sur les résultats obtenus (moins de cellules mais avec une taille moyenne plus grosse) peut s'expliquer par le fait que la loi de mélange massique a tendance à sous-estimer la conductivité thermique du mélange et donc imposer un nombre de Lewis plus faible. Les différences observées entre les deux lois de mélange peuvent s'expliquer via le fait que la taille des cellules diminuent avec le

nombre de Lewis (Kadowaki *et al.* (2005b)) et que le front de flamme devient plus instable en diminuant le nombre de Lewis (Kadowaki *et al.* (2005b)). La loi de mélange Mathur-Saxena sera utilisée dans le reste de ce mémoire (chapitres 4 et 5).

Le dernier paramètre testé fut la condition de sortie (section 3.3.2.2) : une condition de Neumann en sortie fut testée pour la cinétique chimique de San Diego avec la loi de mélange de Mathur-Saxena. Celle-ci présentant une résolution numérique plus élevée que la condition de sortie de Dirichlet (les résidus de la continuité et de la quantité de mouvement étaient environ trois fois plus faible avec la condition de Neumann par rapport à la condition de Dirichlet) et une évolution plus rapide de la cellularité, il fut décidé de l'utiliser dans le reste de ce mémoire (chapitres 4 et 5).

Le prochain chapitre portera sur l'impact d'un autre paramètre sur le phénomène de cellularité : l'augmentation de pression.

CHAPITRE 4

INFLUENCE DE LA PRESSION

Ce chapitre porte sur l'impact de l'augmentation de la pression sur le phénomène de cellularité. L'influence de ce paramètre a fait l'objet de plusieurs études (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Yuan *et al.* (2007)) mais pour des ordres de résolution plus élevés des schémas de discrétisation (ordre 6). Ainsi, cette étude se donne pour objectifs de caractériser l'influence d'une augmentation de pression sur la cellularité mais pour un code commercial (STAR-CCM+) d'ordre de résolution d'ordre 2 et tenter de caractériser et quantifier les différences obtenues par rapport aux études citées précédemment. La cinétique chimique de San Diego va donc être testée selon trois conditions de pression : 1 atmosphère, 2.5 atmosphères et 5 atmosphères. Dans un premier temps, la fraction molaire de OH ainsi que la température, permettant de mieux visualiser le phénomène de cellularité lorsque l'épaisseur de flamme diminue, pour chaque cas de pression seront étudiées comme effectué dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011)), puis dans un second temps ces différents cas de pression seront comparés au travers de différents paramètres.

4.1 Contexte numérique

Toutes les simulations qui vont être présentées dans ce chapitre ont été effectuées avec la cinétique chimique de San Diego, une richesse de 0.4, la condition de sortie de type Neumann et le front de flamme est initialisé selon la perturbation initiale basique qui est la suivante :

$$x = (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \quad (4.1)$$

Où x et y sont les coordonnées du domaine de simulation, W est la longueur du domaine ($W=20$ mm), b est le décalage afin de positionner la perturbation à $x=15$ mm ($b=5$ mm), H est la hauteur du domaine ($H=20$ mm) et A et B sont les amplitudes de perturbation ($A=25\mu\text{m}$ et $B=50\mu\text{m}$). De plus, le tableau 4.1 présente la vitesse de flamme laminaire (que l'on impose comme vitesse d'entrée du mélange), les épaisseurs de flamme laminaire (calculées selon l'équation 4.2) et le

taux de dégagement de chaleur volumique laminaire pour chaque cas de pression, calculés via le logiciel Chemkin (Reaction Design).

$$\delta_L = \frac{T_b - T_0}{\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{Max}} \quad (4.2)$$

Où T_b est la température des gaz brûlés et T_0 la température d'entrée du mélange.

Tableau 4.1 Vitesse de flamme laminaire, épaisseur de flamme laminaire et taux de dégagement de chaleur volumique laminaire en fonction de la pression

Pression (atm)	S_L (cm·s ⁻¹)	Épaisseur de flamme (mm)	Taux de dégagement de chaleur volumique (10 ⁹ W·m ⁻³)
1	24,69	0,582	0,746
2,5	13,91	0,326	2,522
5	6,438	0,305	3,778

4.2 1 atmosphère

La première simulation effectuée fut testée dans les conditions atmosphériques (1 atmosphère), que nous appellerons "San Diego 1 atm" afin de faciliter la lecture. Les Figures 4.1 et 4.2 représentent respectivement l'évolution de la fraction molaire de OH et de la température au cours du temps entre 2.5 et 20 ms, par intervalle de temps de 2.5 ms (lecture de gauche à droite et de haut en bas) pour San Diego 1 atm. Comme nous pouvons l'observer sur la Figure 4.1, à 1 atmosphère, le front de flamme reste plan jusqu'à 2.5 ms, puis vers 5 ms de légères ondulations commencent à apparaître. Vers 7.5 ms les premières cellules naissent et sont au nombre de 7. Ces cellules vont ensuite grossir jusqu'à 12.5 ms environ, en effectuant une première fusion de cellules vers 12.5 ms (les cellules situées entre les cellules aux extrémités et la cellule centrale). À partir de 12.5 ms, le front de flamme va prendre une forme concave vers les gaz frais, indiquant une propagation plus rapide des cellules situées aux extrémités. De plus, une division de cellules s'amorce vers 12.5 ms (les cellules situées aux extrémités), puis une fusion des cellules centrales vers 17.5 ms. À 20 ms, 4 cellules sont présentes, dont les cellules

situées aux extrémités atteignent un rayon maximal d'environ 3,3 mm. Le nombre de cellules de San Diego 1 atm oscille entre 4 et 7, conditionné par les phénomènes de fusion et division de cellules tel qu'exposé dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Kadowaki *et al.* (2005b)).

La Figure 4.2 représente l'évolution de la température pour San Diego 1 atm au cours du temps et permet de mettre en avant la diffusion thermique, notamment au niveau des cellules où la température atteint un maximum du fait que les cellules sont le siège des réactions chimiques donc d'une exothermie beaucoup plus importante que dans les creux entre les cellules qui ne sont le siège que de peu de réactions. Ce phénomène est caractérisé par les traînées de température que l'on peut observer sur la Figure 4.2 : des traînées de température maximum en aval des cellules (environ 1500 K, couleur jaune vif) et des traînées de température plus faible (environ 1300 K, couleur orange) en aval des creux.

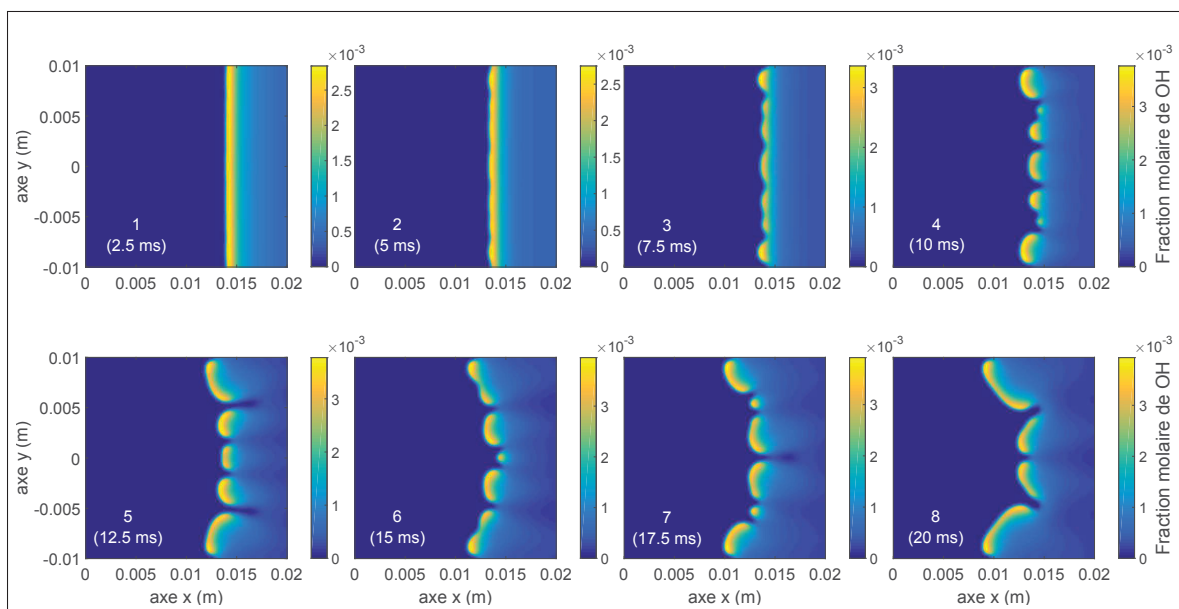


Figure 4.1 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 1 atmosphère

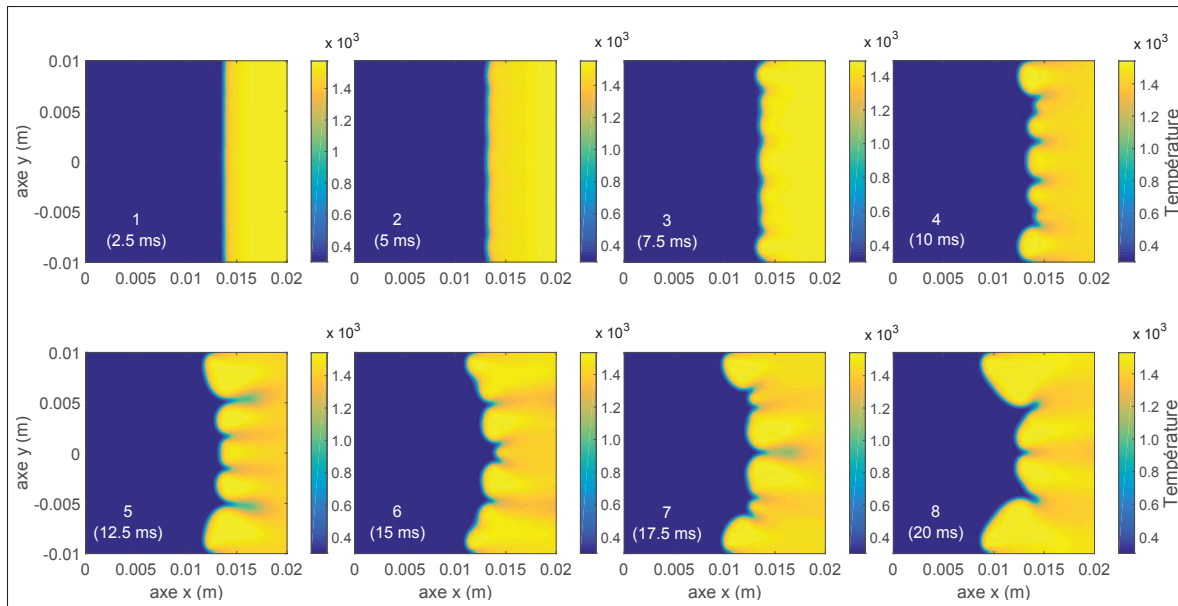


Figure 4.2 Évolution de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 1 atmosphère

4.3 2.5 atmosphères

La deuxième cas de pression étudié fut celui à 2.5 atmosphères. Les Figures 4.3 et 4.4 représentent respectivement l'évolution de la fraction molaire et de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 2.5 atmosphères que nous référencerons en tant que "San Diego 2.5 atm". Comme observé sur la Figure 4.3, pour San Diego 2.5 atm, les cellules n'apparaissent plus vers 7.5 ms comme pour San Diego 1 atm (Figure 4.1) mais dès 2.5 ms et elles sont au nombre de 19. Ces cellules vont alors grossir en passant par des fusions et des divisions de cellules qui sont moins visibles que pour San Diego 1 atm du fait de leur taille moins élevée. À partir de 12.5 ms, le front de flamme va prendre une forme légèrement convexe (alors que celui-ci prenait une forme concave à basse pression comme présenté dans le chapitre 3) indiquant une propagation plus rapide des cellules proches du centre. Ensuite, le front de flamme va garder une forme plutôt convexe, mais marquée par un léger creux au centre, se traduisant cette fois-ci par une propagation plus rapide des zones extrêmes par rapport à la zone centrale. Les différences principales par rapport à San Diego 1 atm sont le nombre de cellules qui oscille ici entre 19 et 8, l'épaisseur de flamme qui est plus faible pour San Diego 2.5 atm que pour San

Diego 1 atm tel que le prédit la théorie (tableau 4.1) ainsi qu'un comportement plus chaotique tel qu'observé dans la littérature (Yu (2013)) : les cellules possèdent une forme moins "lisse" par rapport à San Diego 1 atm. De plus, la diffusion de la chaleur est moins "ordonnée" comme on peut l'observer sur la Figure 4.4, du fait de la présence d'un nombre total de cellules plus important par rapport à San Diego 1 atm, tout comme la diffusion de l'espèce OH sur la Figure 4.3.

Les différences principales entre San Diego 1 atm et San Diego 2.5 atm sont donc : un nombre de cellules plus élevé pour San Diego 2.5 atm, ainsi qu'un comportement plus chaotique (les cellules sont moins "lisses" et peuvent présenter des aspérités) et un front de flamme qui prend une forme plutôt convexe, contrairement à San Diego 1 atm où le front de flamme gardait une forme concave, indiquant une propagation plus rapide non plus des cellules aux extrémités mais des cellules centrales/proches du centre. Afin de vérifier si ces divergences se répercutent également entre San Diego 2.5 atm et San Diego à une pression supérieure à 2.5 atm, la prochaine section porte sur l'étude de la cinétique chimique de San Diego à 5 atmosphères.

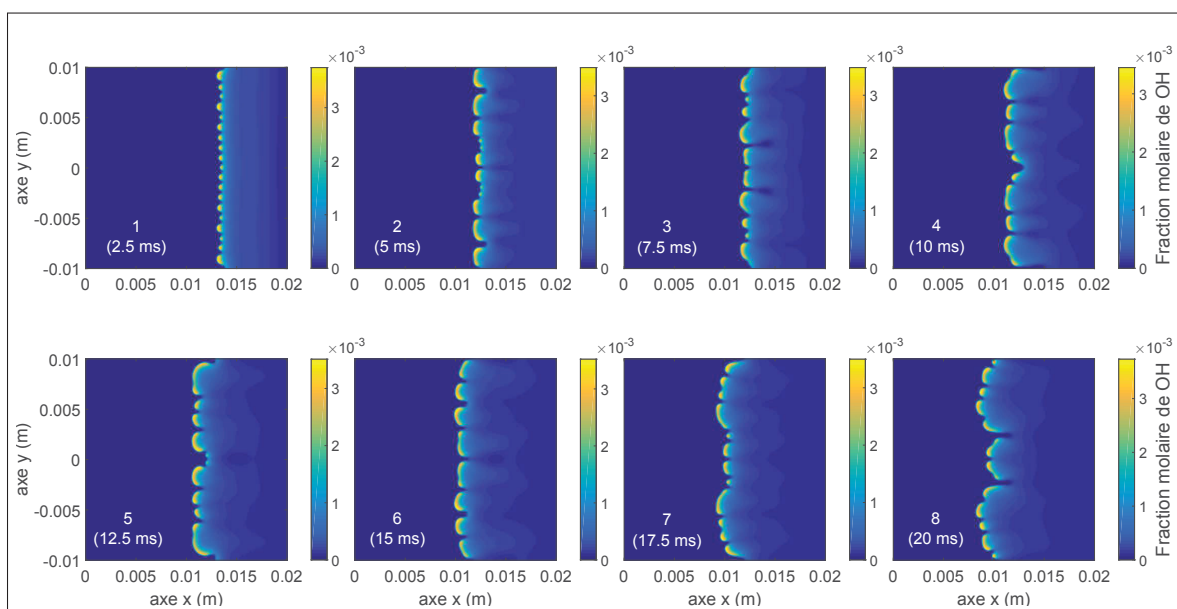


Figure 4.3 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 2.5 atmosphères

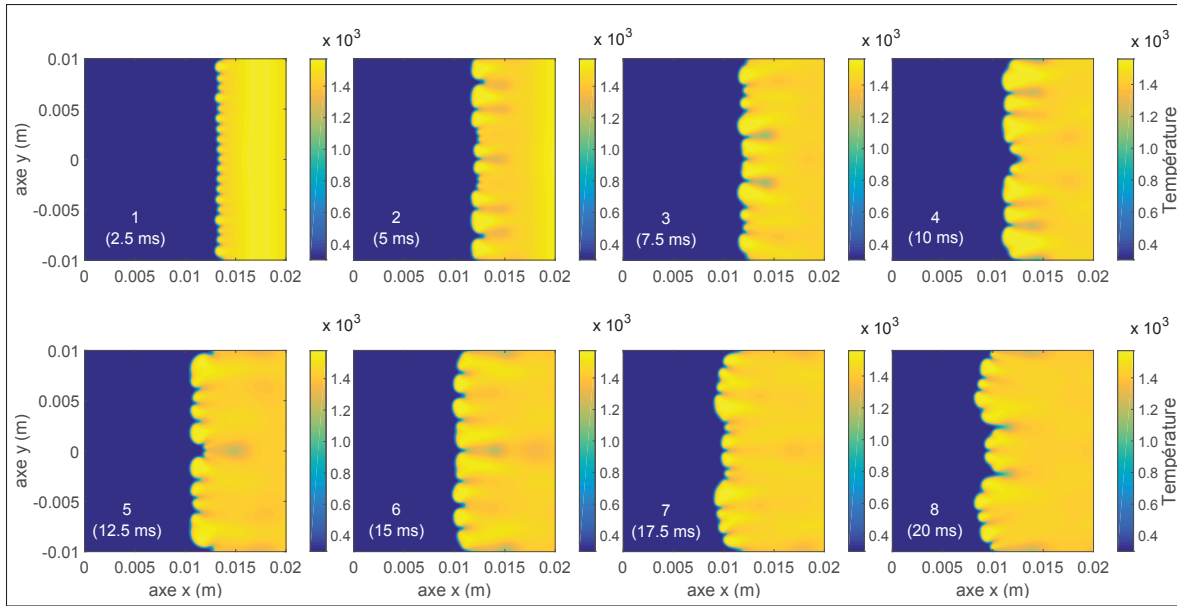


Figure 4.4 Évolution de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 2.5 atmosphères

4.4 5 atmosphères

Le troisième et dernier cas de pression étudié fut celui à 5 atmosphères. Les Figures 4.5 et 4.6 représentent respectivement l'évolution de la fraction molaire et de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 5 atmosphères que nous référencerons en tant que "San Diego 5 atm". Tout comme pour San Diego 2.5 atm, les cellules apparaissent vers 2.5 ms, avec la spécificité ici que les cellules ne sont presque pas visibles du fait de l'épaisseur de flamme qui est relativement faible. À partir de 7.5 ms, quatre cellules vont auto-accélérer de manière brutale vers les gaz frais, les cellules centrales vont se rencontrer afin de fusionner vers 12.5 ms alors que les cellules aux extrémités ne vont se rejoindre qu'après 20 ms. À partir de 17.5 ms le front de flamme va prendre une forme plutôt convexe, plus marquée que pour San Diego 2.5 atm. Tout comme pour le passage de 1 atmosphère à 2.5 atmosphères (section 4.2 et 4.3), le passage de 2.5 atmosphères à 5 atmosphères se caractérise par une épaisseur de flamme qui diminue, un nombre de cellules plus élevé, une propagation beaucoup plus rapide pour certaines cellules ainsi qu'un front de flamme devenant plus chaotique. Cette dernière caractéristique est cependant plus importante de 2.5 à 5 atmosphères que de 1 à 2.5 atmosphères

et peut potentiellement indiquer la limite de l'utilisation de schémas de discrétisation d'ordre 2. En effet, dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Regele *et al.* (2013)), l'évolution de la flamme est similaire (augmentation du nombre de cellules avec la pression, ainsi que le front de flamme devenant moins épais et plus chaotique), avec notamment la présence de zones de cellules qui s'auto-accélèrent vers les gaz frais, mais cependant les cellules sont plus "lisses" tout comme les aspérités sur ces mêmes cellules. Cette différence peut provenir de l'ordre de résolution des schémas de discrétisation utilisés (et donc du maillage) : en effet, l'étude de Yu (2013) sur ce paramètre a permis de mettre en évidence l'impact important de celui-ci sur le phénomène de cellularité, notamment vis-à-vis du fait que le front de flamme devient plus "lisse" en augmentant l'ordre de résolution des schémas de discrétisation. Ce même constat est effectué en observant l'évolution de la température au cours du temps pour San Diego 5 atm présenté sur la Figure 4.6 : bien que les traînées de diffusion de chaleur soient en accord avec les résultats présentés précédemment (le nombre de cellules augmentant avec la pression, le nombre de creux également, et donc induisent des traînées de diffusion de chaleur plus hétérogène que pour San Diego 1 atm et San Diego 2.5 atm qui comportaient moins de cellules), celles-ci sont moins visibles et moins marquées que dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Regele *et al.* (2013)), possiblement à cause de l'ordre de résolution des schémas de discrétisation ainsi que la finesse du maillage, plus faible ici. Les résultats présentés ici à 5 atmosphères peuvent donc indiquer une limite de l'utilisation des schémas de discrétisation spatiale et temporelle d'ordre deux qui ne semblent pas suffisamment élevé pour simuler correctement le phénomène de cellularité à haute pression avec ce maillage.

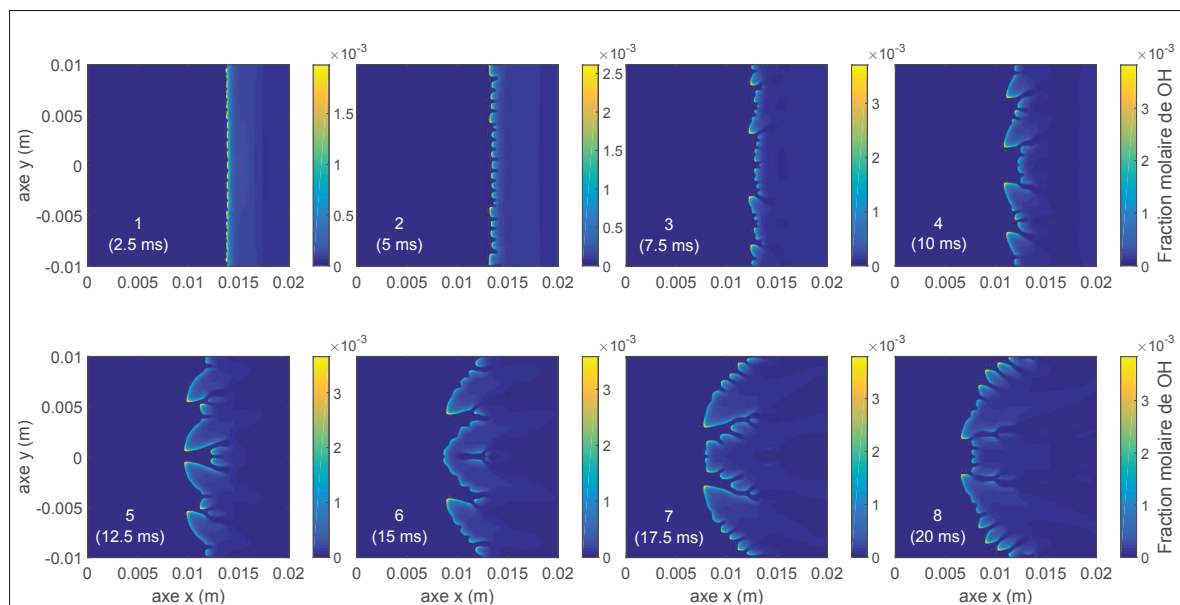


Figure 4.5 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 5 atmosphères

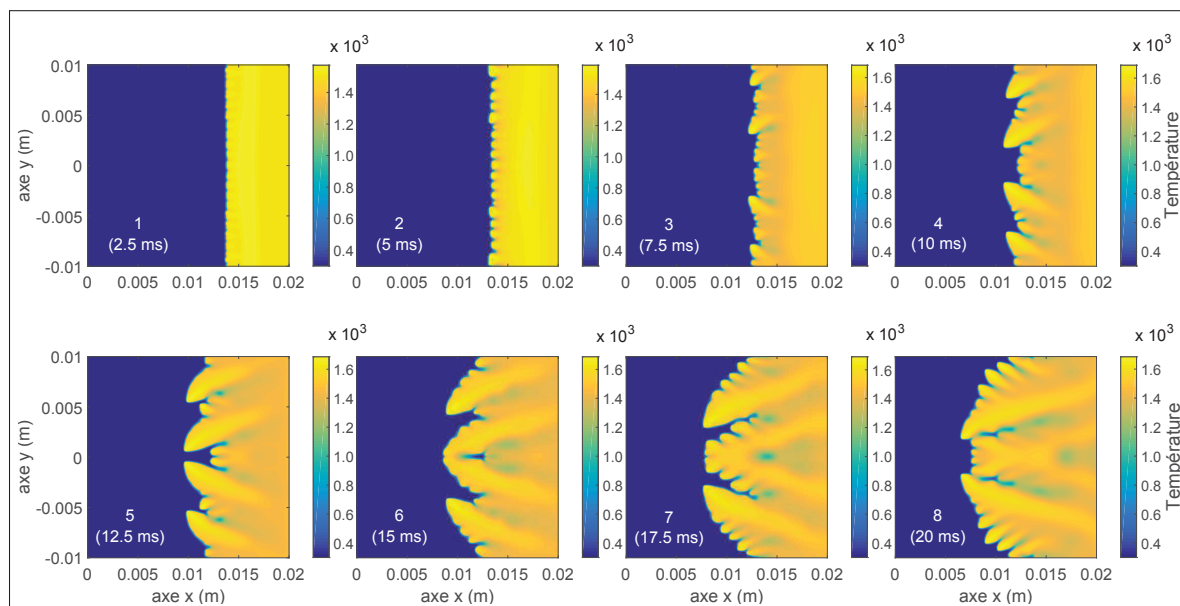


Figure 4.6 Évolution de la température au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego à 5 atmosphères

4.5 Comparaison des différents cas de pression

En plus de l'étude de la fraction molaire et de la température pour chaque cas de pression comme effectué dans les sections 4.2, 4.3 et 4.4, des paramètres tels que le nombre de cellules, le taux de déformation maximal et le taux de dégagement de chaleur maximal vont être étudiés afin de fournir des éléments de comparaison entre les différents cas de pression.

4.5.1 Nombre de cellules

Comme cela a été effectué dans le chapitre 3, le nombre de cellules pour chaque cas de pression comme présenté sur la Figure 4.7 va être étudié. La Figure 4.7 nous permet d'observer que l'augmentation de pression induit une augmentation de cellules : ce nombre oscille respectivement entre 5-7, 8-19 et 12-24 pour 1 atmosphère, 2.5 atmosphères et 5 atmosphères, avec la particularité que l'oscillation du nombre de cellules totales est plus importante au fur et à mesure que la pression croît. Ce phénomène d'augmentation du nombre de cellules avec l'augmentation de pression est un résultat cohérent avec la littérature (Yu (2013), Yuan *et al.* (2007) et peut s'expliquer par le fait qu'une augmentation de pression entraîne une diminution du nombre d'onde critique k_c (nombre d'onde minimal pour lequel la perturbation imposée va donner naissance à la cellularité) (Yuan *et al.* (2007)). Ainsi, il est possible d'émettre l'hypothèse qu'avec l'augmentation de pression et donc la diminution du nombre d'onde critique k_c , la même perturbation initiale donnera naissance à plus de cellules à haute pression du fait de son nombre d'onde critique plus faible. De plus, il est possible de noter que pour San Diego 1 atm, les cellules n'apparaissent qu'à partir de 5 ms alors que pour San Diego 2.5 atm et San Diego 5 atm, les cellules apparaissent avant 2.5 ms, ainsi que le phénomène de fusion et division de cellules qui semble être amplifié à haute pression du fait du nombre oscillant de cellules plus important à 5 atmosphères qu'à 1 et 2.5 atmosphères.

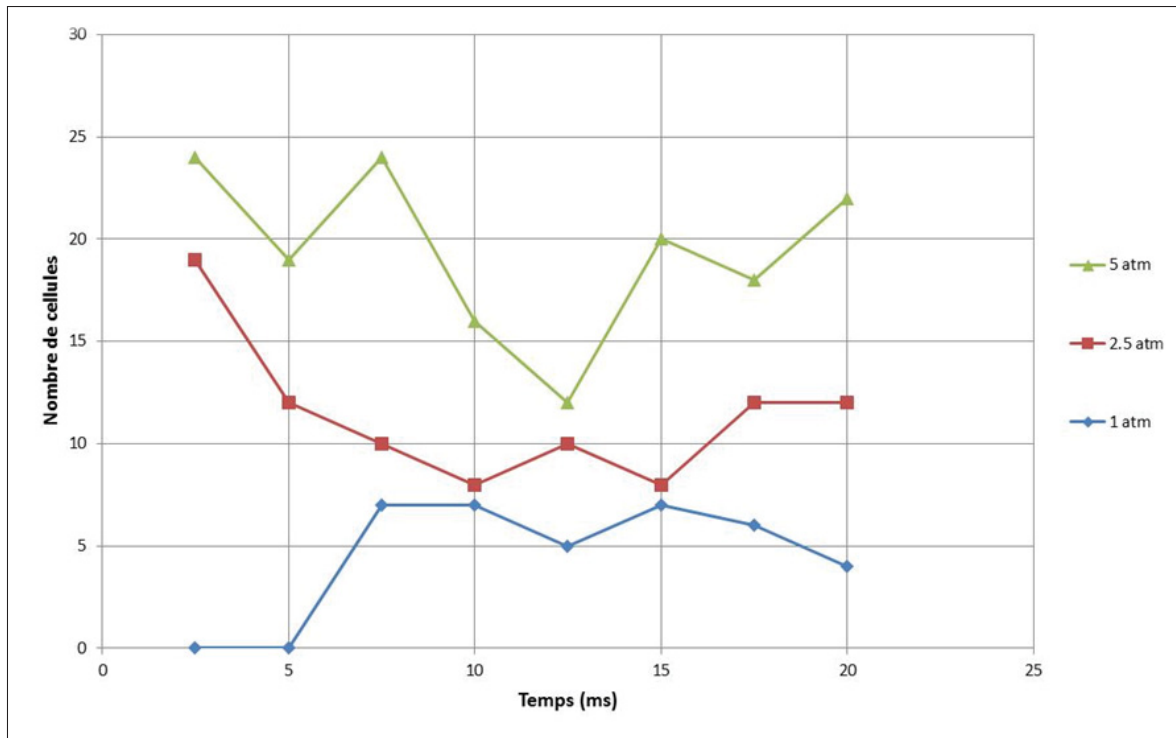


Figure 4.7 Nombre de cellules au cours du temps pour chaque cas de pression

4.5.2 Taux de déformation

La Figure 4.8 représente l'évolution du taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cas de pression étudié. Comme on peut l'observer sur la Figure 4.8, le taux de déformation maximal va croître avec une augmentation de la pression : les valeurs moyennes, une fois le plateau atteint, du taux de déformation maximal pour 1 atmosphère, 2.5 atmosphères et 5 atmosphères sont respectivement d'environ 1430, 2300 et 3410 s^{-1} . Ces résultats semblent coïncider avec ceux présentés dans la section 3.2.2 vis-à-vis du fait que plus le nombre de cellules est important, plus la variation de la composante longitudinale de la vitesse selon l'axe transverse est importante, de même pour la composante transversale et donc une déformation maximale du front de flamme en moyenne plus importante. Bien que les cas de pression à 1 et 5 atmosphères soient similaires (croissance continue du taux de déformation maximal de 2.5 à 10 ms pour 1 atmosphère avant d'atteindre un palier, et croissance continue de 2.5 à 7.5 ms pour 5 atmosphères avant d'atteindre un palier également), le cas à 2.5 atmosphères se distingue par le

fait qu'un palier soit déjà atteint dès 2.5 ms, pouvant indiquer que le phénomène de cellularité se développe initialement plus rapidement à 2.5 atmosphères qu'à 1 et 5 atmosphères.

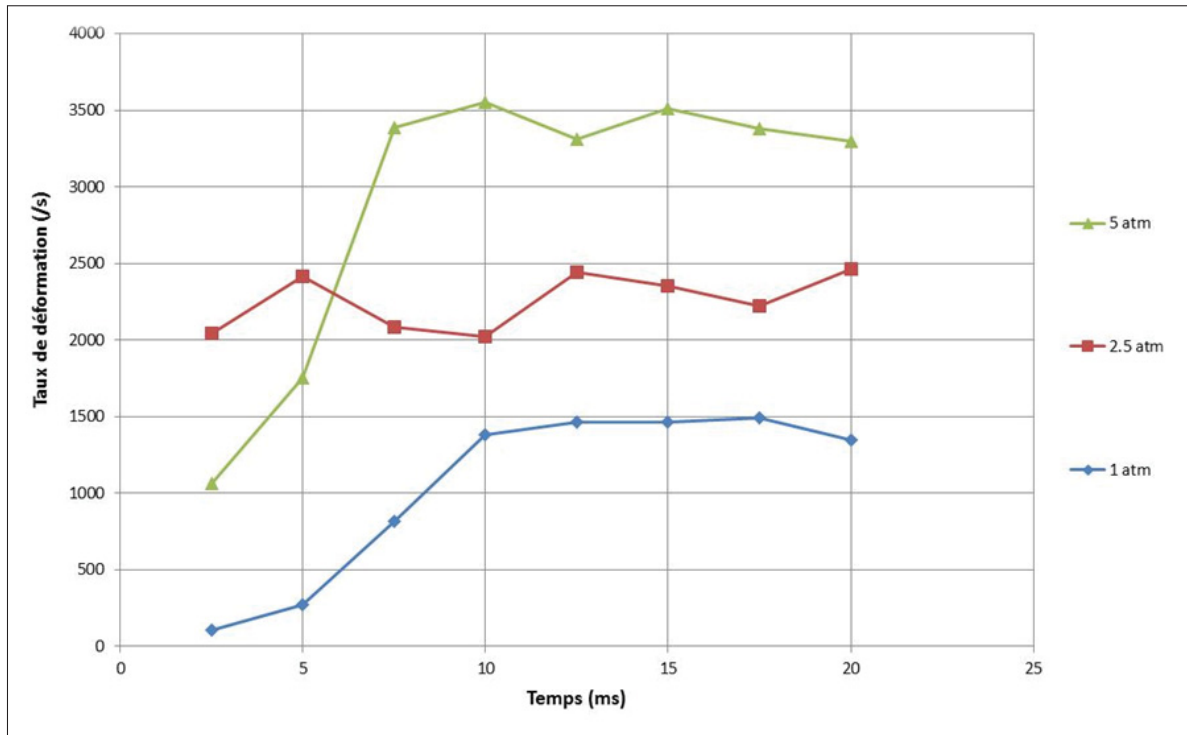


Figure 4.8 Taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cas de pression

4.5.3 Taux de dégagement de chaleur

Comme effectué dans la littérature (Yu (2013)), le taux de dégagement de chaleur volumique de chaque cas de pression est adimensionnalisé par la valeur de ce taux pour une flamme laminaire (tableau 4.1). Afin de faciliter la lecture, nous appellerons le taux de dégagement de chaleur volumique adimensionnalisé "HRR", et la Figure 4.9 représente l'évolution du HRR au cours du temps en fonction de chaque cas de pression (1 atmosphère : image du haut, 2.5 atmosphères : image du milieu, 5 atmosphères : image du bas). Tout comme pour le taux de déformation maximal (Figure 4.8), les cas de pression à 1 atmosphère et 5 atmosphères connaissent une croissance continue de leur HRR jusqu'à 10 ms environ, indiquant l'établis-

ment du phénomène de cellularité. Cependant, le cas à 2.5 atmosphères présente un maximum de son HRR vers 2.5 ms, décroît jusqu'à 7.5 ms, puis atteint un pseudo palier de 7.5 à 17.5 ms avant de recroître. Les évolutions des HRR des cas 1 et 5 atmosphères sont cohérents avec ceux obtenus par Yu (2013), le HRR de la cinétique chimique de San Diego à 1 atmosphère étant inférieur à celui de San Diego à 5 atmosphères, de même pour leur évolution : elles connaissent une croissance pendant environ 10 ms avant d'atteindre un palier (avec de légères fluctuations). Cependant, le cas à 2.5 atmosphères ne suit pas la même évolution : celui-ci atteint un palier dès 2.5 ms avec des fluctuations maximums à 2.5 et 20 ms d'environ 5% par rapport à la valeur moyenne. Il est possible d'émettre l'hypothèse que les différences observées peuvent provenir de la forme du front de flamme qui est presque plane (de manière globale) ou bien qu'il s'agisse d'un cas de transition, puisqu'aucune étude ne porte sur le HRR à 2.5 atmosphères, nous n'avons cependant aucun élément de comparaison. De manière globale, les cas à 1 et 5 atmosphères suivent la même tendance d'évolution de HRR, le cas à 2.5 atmosphères étant un cas particulier. De plus, le HRR moyen croît avec l'augmentation de pression et peut être mis en relation avec le fait que l'augmentation de pression induit un nombre de cellules qui augmente, donc des plissements du front de flamme plus important et donc une surface de flamme plus importante, ce qui accroît le HRR, tel qu'observé par Yu (2013).

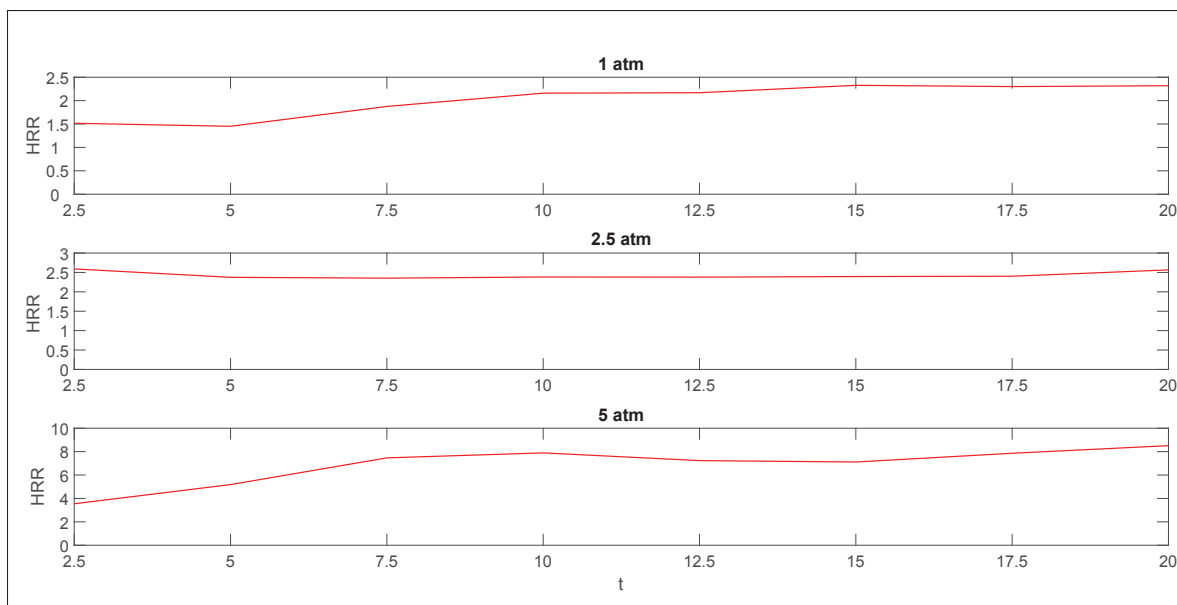


Figure 4.9 Taux de dégagement de chaleur maximal adimensionné au cours du temps pour chaque cas de pression

4.6 Conclusion du chapitre

L'influence de la pression sur la création et le développement de la cellularité fut l'objet d'étude de ce chapitre, et ce pour trois cas de pression : 1, 2.5 et 5 atmosphères. La première observation effectuée est que le comportement de la flamme et du phénomène de cellularité suivent les mêmes tendances que celles présentées dans la littérature : avec l'augmentation de pression, le nombre de cellules augmentent, ainsi que le front de flamme devenant plus fin et plus chaotique. Les paramètres étudiés afin de comparer chaque cas de pression suivent une tendance similaire également : l'augmentation de pression induit un nombre de cellules plus important, qui implique une augmentation des valeurs maximales du taux de déformation et du HRR. Cependant, comme présenté sur la Figure 4.5, à partir de 5 atm le front de flamme devient trop chaotique et prend une forme dentelée, indiquant un léger contraste avec les résultats de Yu (2013) ou encore Altantzis *et al.* (2011) où le front de flamme est plus lisse et moins dentelé. Cette différence peut reposer sur l'ordre de résolution des schémas de discrétisation utilisés ici (ordre 2 en temps et en espace), potentiellement trop faible par rapport à l'ordre de résolution de ces schémas utilisés dans la littérature (ordre 6 généralement) et peut donc indiquer ici une

limite de l'utilisation de schémas de discrétisation d'ordre 2 avec le maillage utilisé ici. De plus, l'absence de mouvement latéral des cellules par rapport à celui que l'on peut observer dans la littérature (Yu (2013), Altantzis *et al.* (2011), Kadowaki *et al.* (2005b)) peut provenir de plusieurs facteurs. Tout d'abord, la géométrie utilisée, qui peut être supposée comme un facteur empêchant le mouvement latéral des cellules puisque la géométrie utilisé ici est la même que Regele *et al.* (2013), et dont les résultats n'indiquent aucune présence de mouvement latéral des cellules non plus. Ensuite, ce mouvement latéral peut être également bloqué à cause des erreurs numériques, comme supposé par Yu (2013), c'est pourquoi l'utilisation d'ordres de résolution élevés des schémas de discrétisation est préférée.

L'influence de la pression sur la création et le développement du phénomène de cellularité ayant été étudiée, le prochain chapitre portera sur l'influence de la condition initiale du front de flamme sur ce phénomène.

CHAPITRE 5

INFLUENCE DE LA PERTURBATION INITIALE

Ce chapitre porte sur l'influence de la perturbation initiale sur la création et le développement du phénomène de cellularité. En effet, comme présenté dans le chapitre 2, une perturbation initiale est imposée afin de forcer l'apparition de cellules, cependant aucune justification des différents choix des paramètres de cette perturbation n'est présentée dans la littérature. Cette perturbation est de type sinusoïdale et comporte deux paramètres principaux qui vont être étudiés : l'amplitude des perturbations et la fréquence des oscillations. Trois différents types de perturbation initiale vont être étudiés : amplitude divisée par deux, fréquence d'oscillation multipliée par deux et une combinaison de ces deux paramètres. Dans un premier temps chaque cas de perturbation sera étudié individuellement au travers de l'évolution de la fraction molaire au cours du temps. Puis dans un second temps, les différents cas de pression seront comparés entre eux via le nombre de cellules, le taux de déformation et le taux de dégagement de chaleur.

5.1 Contexte numérique

Toutes les simulations qui vont être présentées dans ce chapitre ont été simulées avec la cinétique chimique de San Diego, une pression imposée de 1 atmosphère, avec une vitesse d'entrée du mélange des gaz frais de $24,69 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, correspondant à une richesse de 0.4 et la condition de sortie de type Neumann. Pour rappel, la perturbation initiale est définie de la manière suivante :

$$x = (W - b) - A \cos\left(\frac{2\pi y}{H}\right) - B \cos\left(\frac{40\pi y}{H}\right) \quad (5.1)$$

Où x et y sont les coordonnées du domaine de simulation, W est la longueur du domaine ($W=20 \text{ mm}$), b est le décalage afin de positionner la perturbation à $x=15 \text{ mm}$ ($b=5 \text{ mm}$), H est la hauteur du domaine ($H=20 \text{ mm}$) et A et B sont les amplitudes de perturbation. Chaque cas de perturbation initiale étudié dans ce chapitre est représenté sur la Figure 5.1, superposé à la perturbation initiale basique.

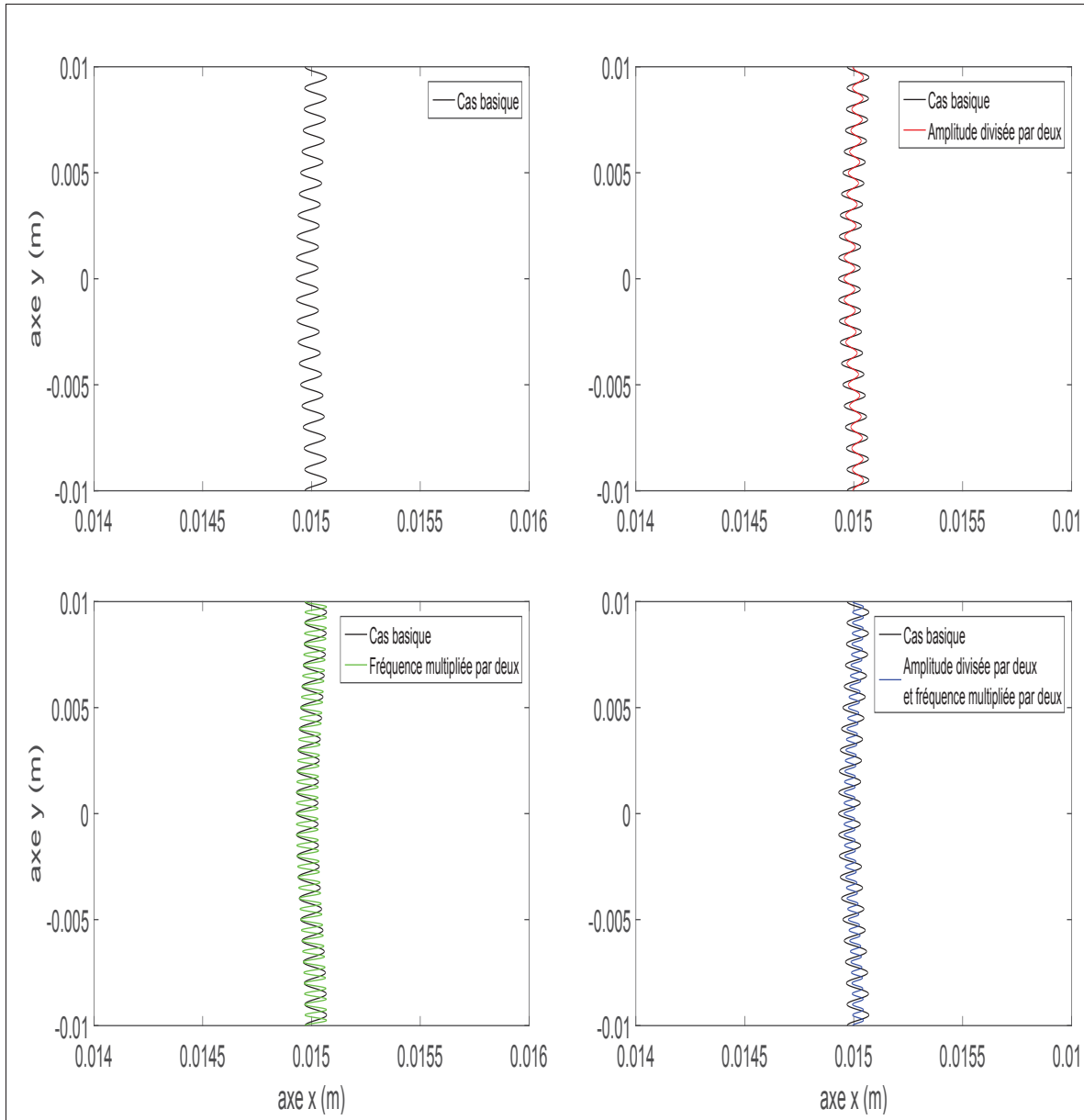


Figure 5.1 Conditions de perturbations initiales

5.2 Amplitude divisée par deux

Dans cette section, les amplitudes de perturbation ont été modifiées ($A=25\mu\text{m}$ et $B=25\mu\text{m}$) de telle sorte que l'amplitude de la perturbation soit réduite de moitié par rapport au cas de base (où $A=25\mu\text{m}$ et $B=50\mu\text{m}$). Afin de faciliter la lecture, nous référencerons ce cas de simulation dont l'amplitude de la condition initiale de perturbation a été divisée par deux en tant que "San

Diego B25". La Figure 5.2 représente l'évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour San Diego B25, entre 2.5 et 20 ms par intervalle de temps de 2.5 ms (lecture de gauche à droite et de bas en haut).

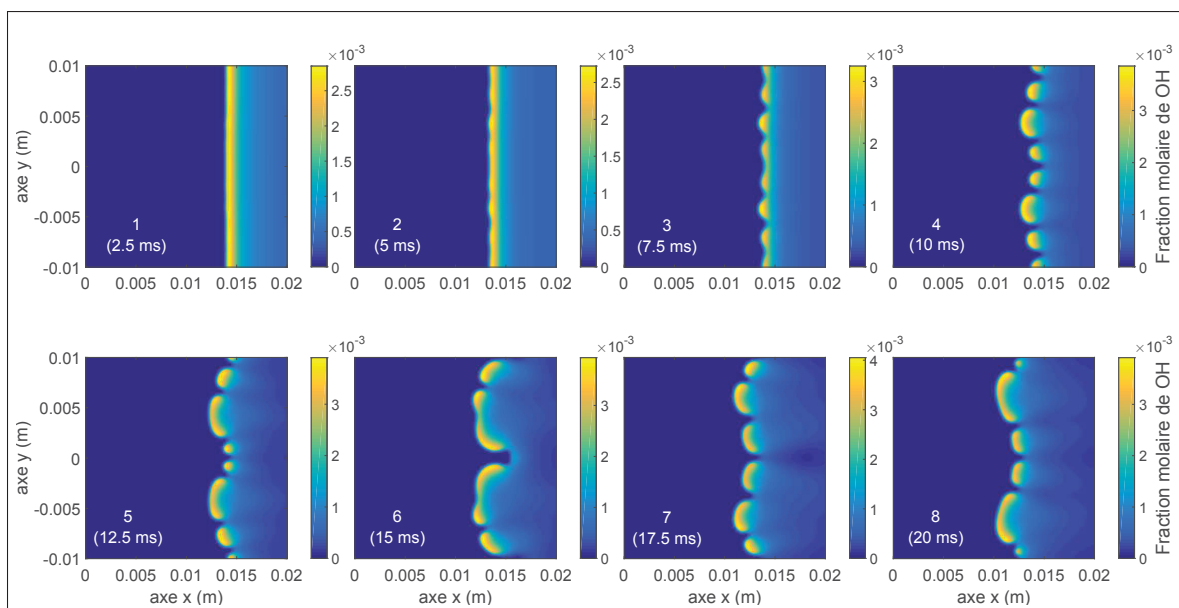


Figure 5.2 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego B25

Comme pour le cas de base (San Diego 1 atm, section 4.2), le front de flamme reste plan jusqu'à environ 5 ms, où de légères ondulations commencent à apparaître. Des cellules naissent vers 7.5 ms tout comme pour le cas de base, celles-ci sont au nombre de 7 et vont grossir jusqu'à environ 12.5 ms, il est également notable que le front de flamme commence à prendre une forme légèrement convexe à partir de 10 ms. Une première division de cellules a lieu vers 15 ms, faisant passer le nombre de cellules de 4 à 6 vers 17.5 ms. Le passage entre 17.5 et 20 ms est potentiellement marqué par une fusion puis une division de cellules du fait de la taille importante des cellules aux extrémités. De plus, à partir de 20 ms le front de flamme va prendre une forme légèrement concave, indiquant une propagation plus rapide des cellules aux extrémités. En plus de la diminution par deux des amplitudes de perturbation, un test a été également effectué pour les amplitudes de perturbation multipliées par deux. Ce test a été réalisé pour la cinétique chimique de San Diego avec la loi de mélange de fraction massique et

la condition de sortie de Dirichlet mais n'a pas été renouvelé avec la loi de mélange "Mathur-Saxena" et la condition de Neumann du fait qu'il présentait des résultats non physiques (annexe III.3).

5.3 Période multipliée par deux

Dans cette section, l'effet de l'augmentation de la fréquence de la perturbation initiale va être étudié. La Figure 5.3 représente l'évolution de la fraction molaire au cours du temps pour une condition initiale dont la fréquence a été doublée, cette simulation sera référencée en tant que "San Diego DO".

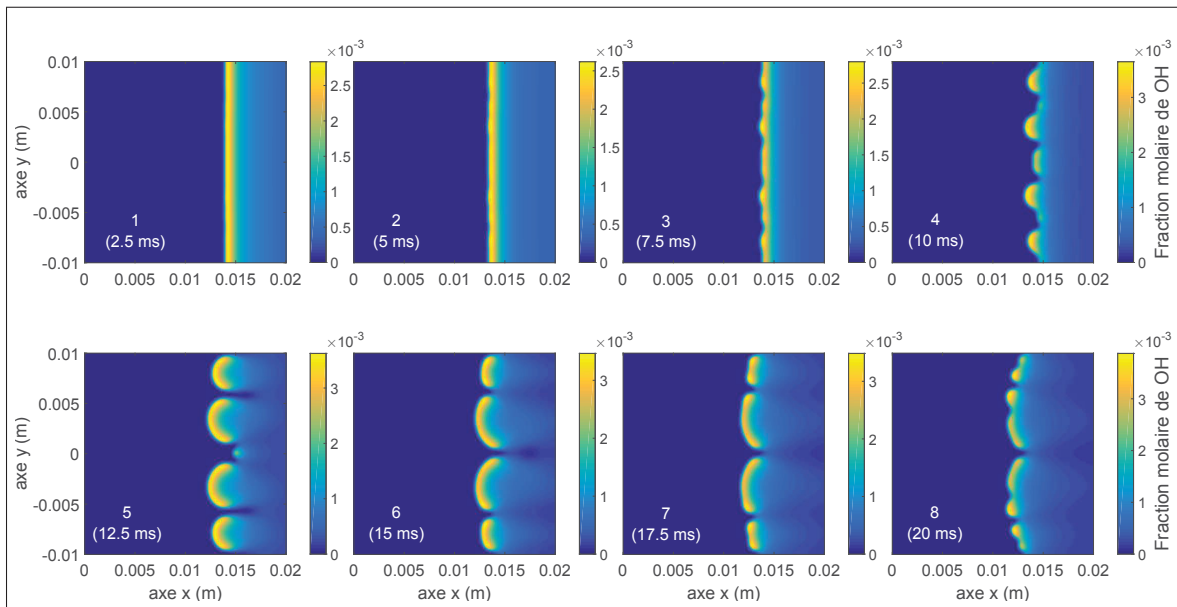


Figure 5.3 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego DO

Comme il est possible de l'observer sur la Figure 5.3, San Diego DO se différencie dès les 5 premières millisecondes du fait que le front de flamme reste plan non pas jusqu'à 2.5 ms comme pour les autres simulations telles que la cinétique de San Diego à 1 atmosphère avec la perturbation initiale de base (section 4.2) ou encore San Diego B25 (section 5.2), mais jusqu'à

5 ms. Les premières ondulations au niveau du front de flamme commencent à apparaître vers 7.5 ms tandis que les premières cellules apparaissent vers 10 ms : celles-ci sont au nombre de 5. Le nombre de cellules va ensuite passer de 5 à 4 de 10 à 12.5 ms, tout en grossissant. Puis, à partir de 15 ms, les cellules vont "décroître" comme si la perturbation s'effaçait, tout comme le front de flamme qui redevient plan au fur et à mesure du temps. L'image n°8 de la Figure 5.3 se caractérise par des cellules de taille très faible (6 en tout environ, laissant supposer un phénomène de division de cellules entre 17.5 et 20 ms) ainsi qu'un front de flamme presque plan. Globalement, la perturbation initiale imposée ici (fréquence d'oscillation multipliée par deux) affecte particulièrement la cellularité. Premièrement, les cellules naissent plus tard par rapport aux autres simulations (San Diego 1 atmosphère et San Diego B25), ainsi que le front de flamme qui semble redevenir plan. Il est possible d'émettre l'hypothèse ici que la longueur d'onde de la perturbation initiale imposée n'est pas suffisamment "élevée" pour permettre le développement de la cellularité, d'où la décroissance de celle-ci au cours du temps.

5.4 Amplitude divisée par deux et période multipliée par deux

La Figure 5.4 représente l'évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego avec une perturbation initiale dont l'amplitude a été divisée par deux et la période multipliée par deux. Nous appellerons cette simulation "San Diego DOB25" afin de faciliter la compréhension.

Comme il est possible d'observer sur la Figure 5.4, la flamme reste plan comme jusqu'à 2.5 ms pour les autres cinétiques chimiques. Des ondulations sur le front de flamme commencent à apparaître vers 5 ms, puis 9 cellules vont naître vers 7.5 ms. À partir de 10 ms, tout comme pour San Diego B25, le front de flamme va prendre une forme sinusoïdale à la différence qu'à 10 ms San Diego B25 (Figure 5.2) comporte 7 cellules et dont les cellules centrales sont de taille légèrement inférieure par rapport aux autres cellules alors que pour San Diego DOB25 (Figure 5.4) à 10 ms, 9 cellules sont présentes et les cellules centrales sont de taille très inférieure au reste des cellules. À partir de 12.5 ms deux blocs de cellules vont se distinguer, et ceux-ci vont grossir de manière continue tout en s'auto-accélérant vers les gaz frais et tout

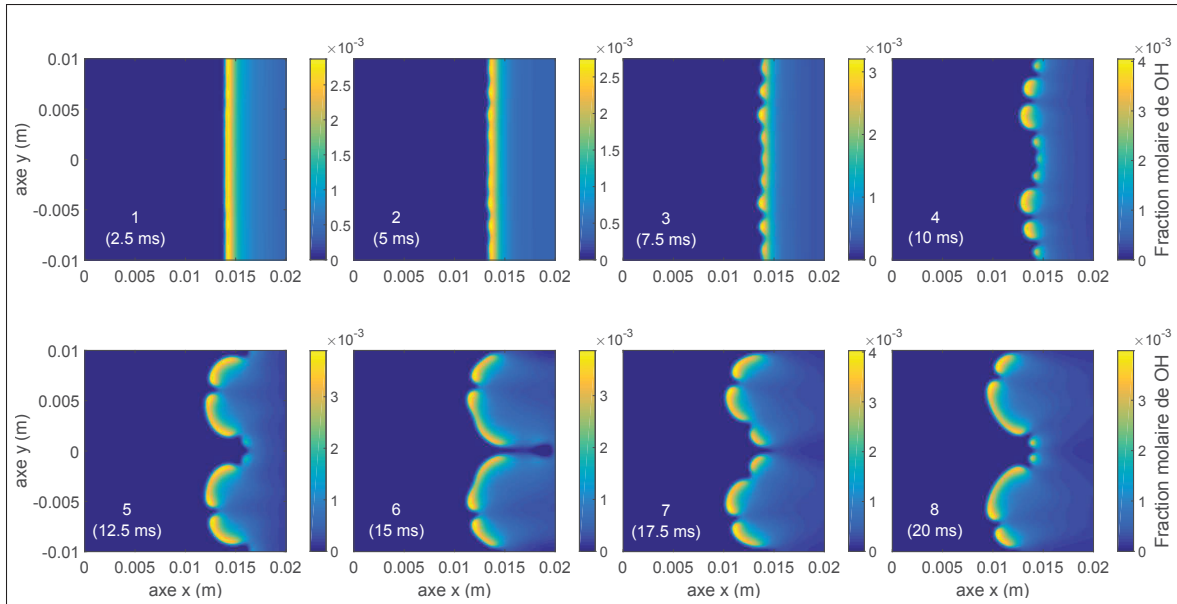


Figure 5.4 Évolution de la fraction molaire de OH au cours du temps pour la cinétique chimique de San Diego DOB25

en effectuant des fusions et des divisions de cellules tel qu’observé pour les autres cinétiques (Figure 5.2 et 5.3). Ces deux blocs se distinguent par leur auto-accélération vers les gaz frais qui est beaucoup plus prononcée que pour toutes les autres cinétiques chimiques présentées dans ce chapitre, indiquant un fort impact de la combinaison de deux modifications effectuées sur le comportement de la flamme. De plus, à la différence de San Diego DOOH (fréquence d’oscillation multipliée par deux), la perturbation initiale semble se développer correctement ici : l’image n°8 de la Figure 5.3 semble indiquer que la perturbation initiale s’estompait alors qu’ici, la combinaison de l’amplitude divisée par deux avec la fréquence d’oscillation multipliée par deux semble induire un développement normal de la perturbation initiale, indiquant un possible lien entre les amplitudes de perturbation et la fréquence d’oscillation, notamment sur le développement de la perturbation initiale imposée.

5.5 Comparaison globale

Les quatre cas de perturbation initiale (cas basique, amplitude divisée par deux, fréquence multipliée par deux et amplitude divisée par deux avec fréquence multipliée par deux) vont

maintenant être comparés entre eux via le nombre total de cellules, le taux de déformation et le taux de dégagement de chaleur afin de fournir des éléments de comparaison.

5.5.1 Nombre de cellules

La Figure 5.5 représente l'évolution du nombre de cellules au cours du temps en fonction de la condition initiale de perturbation utilisée. Comme on peut l'observer sur la Figure 5.5, la condition initiale de perturbation impacte de manière assez importante le nombre de cellules. Le nombre de cellules total pour San Diego 1 atm, San Diego B25, San Diego DO et San Diego DO B25 oscille respectivement entre 4 et 7, 4 et 7, 4 et 8, 4 et 9. On peut d'abord noter que pour chaque cas de perturbation initiale les cellules ne naissent qu'à partir de 7.5 ms excepté pour la perturbation initiale avec la fréquence d'oscillation multipliée par deux, et on peut donc supposer qu'*a contrario* de l'augmentation de pression (section 4.5.1), le changement de condition de perturbation initiale n'impacte pas de manière significative le temps de développement des premières cellules. L'effet de la division d'amplitude de moitié (San Diego B25, courbe rouge) ne semble quant-à-elle pas impacter de manière significative le nombre de cellules. L'effet de la multiplication par deux de la fréquence de la perturbation initiale semble induire un nombre de cellules moyen plus faible que le cas de base (San Diego 1 atm, courbe bleue) et le cas d'amplitude divisée par deux (San Diego B25, courbe rouge), pouvant indiquer qu'une longueur d'onde plus courte entraîne donc un nombre de cellules moyen plus faible. Enfin, les effets de ces deux modifications combinées (amplitude divisée par deux et fréquence multipliée par deux) semble induire un nombre de cellules plus oscillant que le reste des autres cinétiques et indique un fort impact de la modification de ces deux paramètres combinés sur le nombre total de cellules.

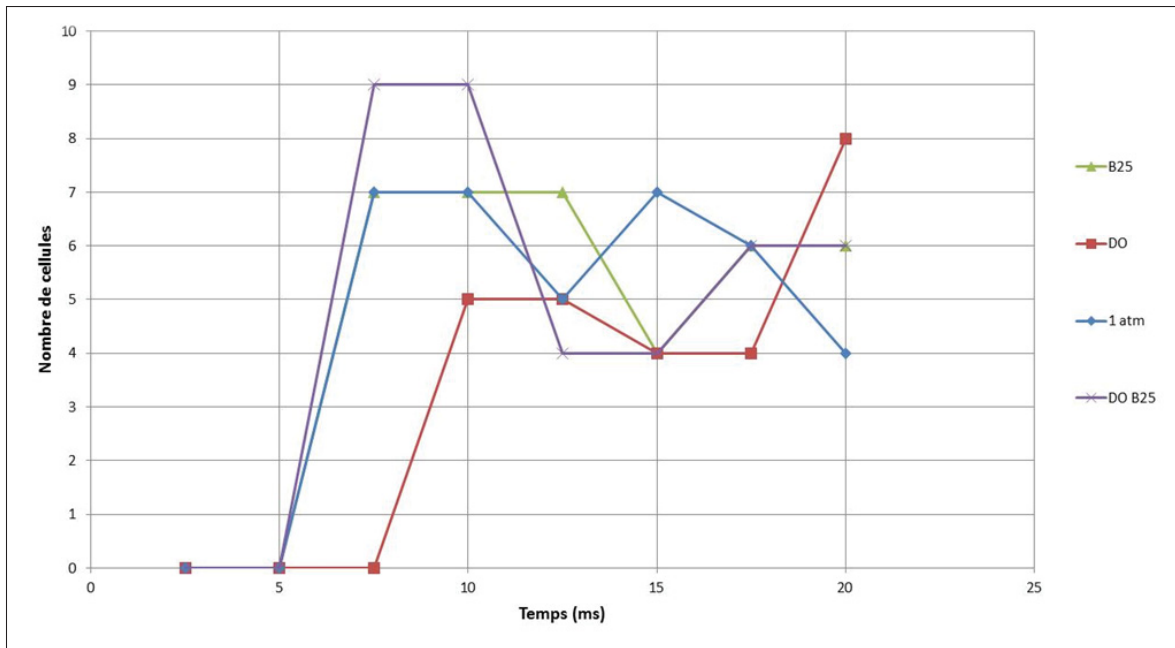


Figure 5.5 Nombre de cellules au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale

5.5.2 Taux de déformation

La Figure 5.6 représente l'évolution du taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale. Comme on peut l'observer sur la Figure 5.6, tout comme dans le chapitre 3, l'évolution globale du taux de déformation maximal en fonction de chaque cas de perturbation initiale suit le même schéma : celui-ci croît de 2.5 à 12.5 ms puis va ensuite osciller, avec des oscillations plus marquées pour San Diego DO et San Diego DOB25. On peut noter également que pendant la période de croissance du taux de déformation, le taux de déformation de San Diego DO (fréquence d'oscillation multipliée par deux) est en moyenne 28% plus faible que pour les autres cas de perturbation initiale (San Diego 1 atm (cas basique), San Diego B25 (amplitude divisée par deux) et San Diego DOB25 (amplitude divisée par deux et fréquence multipliée par deux)) et puisque les résultats présentés sur la Figure 5.3 dans la section 5.2 semble indiquer que cette perturbation va s'estomper, on peut donc supposer qu'imposer une perturbation initiale dont le taux de déformation à 5 ms est inférieur à 260 s^{-1} va s'estomper au cours du temps. Une des observations intéressante qu'il est également possible

de dégager de la Figure 5.6 est le fait que multiplier par deux la fréquence d'oscillation induit un taux de déformation maximal en moyenne plus faible par rapport aux autres perturbation initiale, mais que ce taux de déformation maximal augmente lorsque l'on combine la fréquence d'oscillation multipliée par deux et l'amplitude divisée par deux. On peut donc ici supposer que pour San Diego DO l'amplitude imposée est trop élevée pour la fréquence d'oscillation et induit donc une perturbation qui semble s'estomper comme présenté sur la Figure 5.3, alors qu'en réduisant l'amplitude de moitié, cette perturbation semble se développer (Figure 5.4).

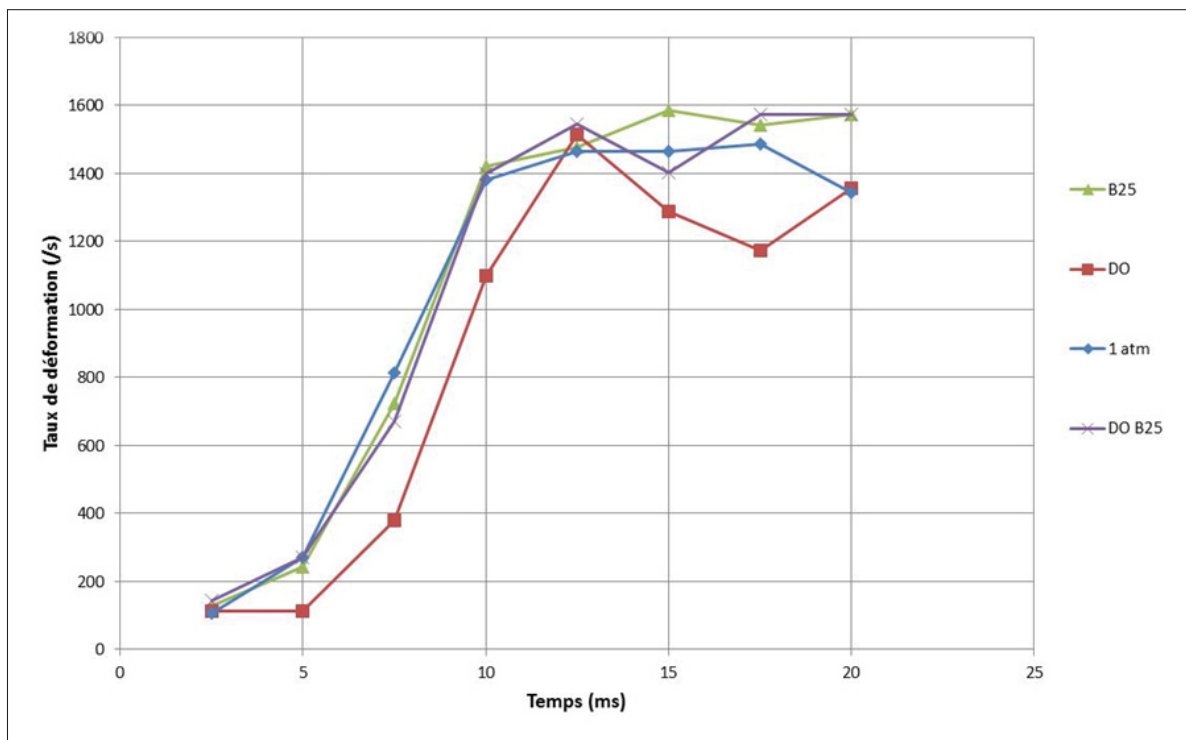


Figure 5.6 Taux de déformation maximal au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale

5.5.3 Taux de dégagement de chaleur

La Figure 5.7 représente l'évolution du taux de dégagement de chaleur maximal en fonction de la perturbation initiale imposée. Comme on peut l'observer sur la Figure 5.7, les tendances du taux de dégagement de chaleur maximal sont les mêmes que celles du taux de déformation

maximal présentées sur la Figure 5.6 de la section 5.5.2. Le taux de dégagement de chaleur maximal croît pendant les 10 premières millisecondes puis celui-ci va osciller, pour chaque cas de perturbation initiale mais avec des oscillations plus prononcées pour San Diego DO. On note également que tout comme pour le taux de déformation maximal, le taux de dégagement de chaleur maximal de San Diego DO se différencie des autres cas par son taux de dégagement de chaleur maximal qui est plus faible que celui des autres cas de perturbation initiale (environ 10%). Tout comme pour le taux de déformation maximal, la combinaison de la fréquence d'oscillation multipliée par deux avec l'amplitude divisée par deux entraîne une hausse du taux de dégagement de chaleur maximal, qui peut être supposée en relation avec le nombre de cellules total qui est plus important pour San Diego DOB25 que pour San Diego DO.

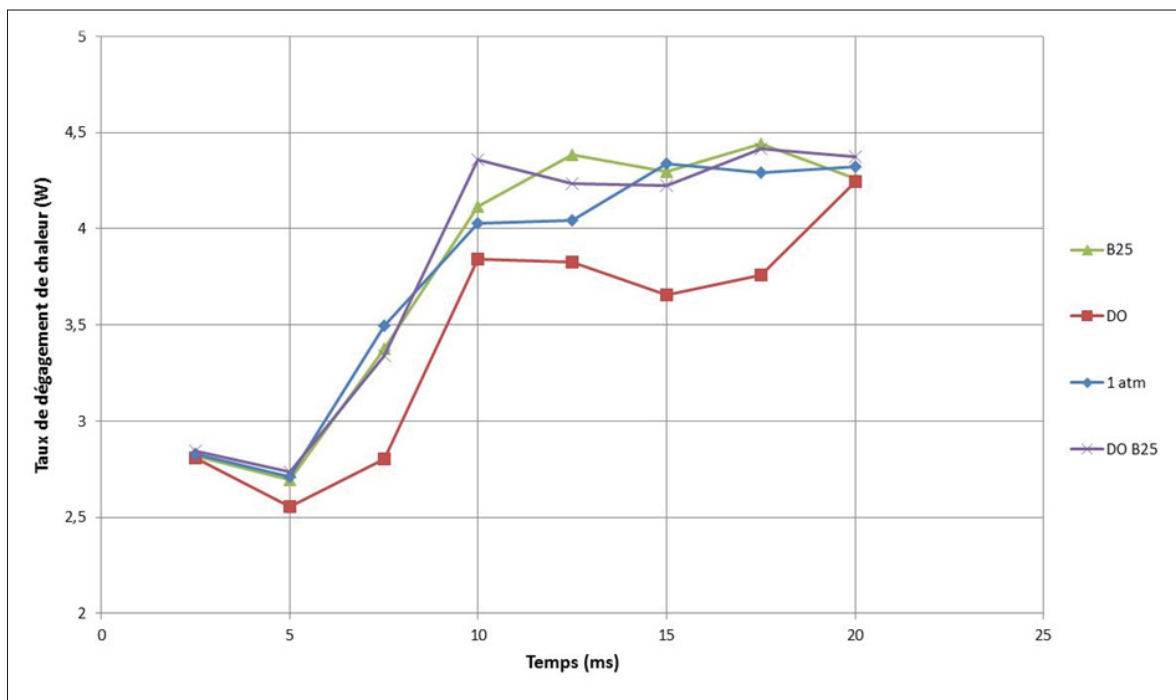


Figure 5.7 Taux de dégagement de chaleur maximal au cours du temps pour chaque cas de perturbation initiale

5.6 Conclusion du chapitre

Comme nous venons de le voir dans ce chapitre, le comportement de la flamme est différent selon la perturbation initiale imposée. Ainsi, l'effet de la division d'amplitude de la perturbation initiale se caractérise par un taux de déformation maximal et un taux de dégagement de chaleur plus élevé que le cas avec la perturbation initiale de base, mais lorsque l'amplitude de la perturbation initiale est multipliée par deux, des résultats non physiques sont obtenus, pouvant indiquer un intervalle d'amplitudes pour lequel une perturbation initiale va se développer ou bien s'estomper. L'effet de la fréquence d'oscillation, ici testé en la multipliant par deux, est également intéressant du fait que dans le test réalisé la perturbation semblait s'estomper, corroboré par un taux de déformation maximal et un taux de dégagement de chaleur maximal en moyenne plus faible que pour les autres cas de perturbation initiale. Enfin, la combinaison de la multiplication de la fréquence d'oscillation et de la division d'amplitude semble contre-carrer l'effet d'effacement de la perturbation initiale induit par la multiplication par deux de la fréquence d'oscillation puisque celle-ci semble se développer tout comme pour le cas basique et pour le cas d'amplitude divisée par deux.

CONCLUSION

De nombreuses études portent sur le phénomène de cellularité, cependant, comme il a été exposé au début de ce mémoire les études réalisées se servent de schémas d'ordre de résolution très élevés ainsi que des maillages très raffinés afin d'étudier ce phénomène et l'influence de différents paramètres sur celui-ci. Ainsi, ce mémoire se donnait pour objectif principal d'étudier l'influence de différents paramètres sur le phénomène de cellularité dans le but de continuer les travaux de caractérisation de ces dernières, et ce via la construction et l'utilisation d'un modèle numérique se servant de schémas de discrétisation d'ordre deux ainsi qu'un maillage moins raffiné.

En tout, quatre paramètres furent testés : la cinétique chimique, la loi de mélange, la pression et la condition initiale de perturbation. Le premier paramètre étudié fut l'influence de la cinétique chimique et il fut observé que le comportement de la flamme différait en fonction de la cinétique chimique utilisée, non pas à cause des propriétés thermodynamiques et de transport des espèces mais possiblement à cause des mécanismes de réactions utilisés ainsi que leur coefficients d'Arrhenius associés, induisant des divergences au niveau du nombre totale de cellules, du taux de déformation maximal et du taux de dégagement de chaleur maximal. Dans un second temps la loi de mélange fut également étudiée, via deux lois de mélange : une loi de mélange basée sur la fraction massique et la loi de mélange Mathur-Saxena. Il fut observé que la forte différence du comportement de la flamme en fonction de la loi de mélange utilisée pouvait provenir du fait que la loi de mélange basée sur la fraction massique a tendance à sous-estimer le nombre de Lewis et donc induire un comportement plus instable de la flamme tel qu'observé dans la littérature. L'étude de ces deux paramètres (cinétique chimique et loi de mélange) remplissant le premier objectif de ce mémoire.

L'influence de l'augmentation de pression sur le phénomène de cellularité fut également étudiée. L'augmentation de pression induisant un nombre de cellules grandissant, ainsi qu'un front de flamme prenant une forme de plus en plus dentelé et chaotique, ainsi qu'un dégagement de chaleur volumique maximal et un taux de déformation maximal grandissant avec l'augmentation de pression, du fait du nombre grandissant de cellules avec l'augmentation de pression.

Globalement, les mêmes tendances que dans la littérature furent observées mais cependant indiquant sa limite de par la forme du front de flamme, plus dentelé par rapport à ce qui est présenté dans la littérature. L'effet de la pression remplissant le deuxième objectif de ce mémoire.

Enfin, la condition initiale de perturbation fut testée pour différents cas et une forte influence de ce paramètre fut observée, avec notamment parfois une perturbation initiale qui s'estompa au cours du temps lorsque sa fréquence d'oscillation fut multipliée par deux, mais lorsque cette modification fut combinée avec une diminution par deux de l'amplitude, la perturbation initiale se développa normalement. Ceci indiquant un possible intervalle de perturbation pour lequel le phénomène de cellularité se développera, en lien avec le taux de déformation maximal imposé durant les premières millisecondes, ainsi qu'un lien possible entre la fréquence d'oscillation et les amplitudes de perturbation du fait que certaines combinaisons de ces deux paramètres permettent un développement d'une perturbation initiale qui ne se développe pas pour cette même fréquence. L'étude de la condition de perturbation initiale remplissant le troisième et dernier objectif de ce mémoire.

RECOMMANDATIONS

L'étude de l'influence des conditions initiales du chapitre 5 a permis de mettre en évidence l'existence d'intervalles de perturbations pour lesquels la perturbation initiale va se développer ou non, en lien avec les amplitudes de perturbation qui ont elles aussi une influence sur ces intervalles de perturbation. Ainsi, il semblerait intéressant de continuer ces travaux afin de caractériser entièrement ces intervalles, et ce aux travers de tests combinant d'autres valeurs de fréquence d'oscillation et d'amplitudes de perturbation.

Dans un second temps, il serait intéressant de raffiner le maillage, potentiellement doubler le nombre de mailles, tout en gardant un ordre de résolution d'ordre 2 dans un premier temps, puis dans un deuxième temps tester le modèle d'ordre 4 puis 6 afin d'être en mesure de quantifier l'influence du raffinement de maillage et de l'ordre de résolution sur la création et le développement des cellules.

Il serait également intéressant d'étudier l'influence d'autres paramètres sur la création et le développement des cellules, des paramètres tels que la richesse (mélange stoechiométrique et mélange riche) afin d'analyser le comportement de la flamme soumise à ce type de mélange. De plus, une étude du phénomène de cellularité en trois dimensions fut réalisée mais pour une seule réaction chimique, ainsi, une étude en trois dimensions avec une cinétique chimique complète pourrait être intéressante. Cependant, les ressources de calcul nécessaires vont alors être conséquentes, tout comme le temps de calcul, et il faudrait au préalable s'interroger quant à la possibilité d'une meilleure parallélisation du domaine afin de concentrer la majeure partie de la puissance de calcul dans la zone de combustion dans le but d'optimiser le temps de calcul.

De plus, des études portent sur l'impact de la modification de la taille du domaine sur la cellularité mais celles-ci utilisent des ordres de résolution élevés (ordre 6) et il pourrait être intéressant d'observer comment le modèle d'ordre 2 réagit à une augmentation et une diminution de la taille du domaine afin de quantifier les différences par rapport aux modèles d'ordre 6. Enfin, il serait également intéressant d'utiliser cette fois-ci une géométrie différente afin de

vérifier l'hypothèse vis-à-vis du mouvement latéral de cellules qui est possiblement bloqué par la géométrie utilisée.

ANNEXE I

INFORMATIONS COMPLÉMENTAIRES SUR LE MODÈLE DE CHIMIE

1. Définitions des fonctions régissant les propriétés des espèces pour la loi de mélange basée sur la fraction massique

Chaleur spécifique :

$$\frac{Cp}{R} = a_1 + a_2T + a_3T^2 + a_4T^3 + a_5T^4 \quad (\text{A I-1})$$

Où Cp est la chaleur spécifique, R la constante des gaz parfaits, T la température et $a_1/a_2/a_3/a_4/a_5$ des paramètres importés via le fichier thermodynamique de la cinétique chimique utilisée.

Conductivité thermique :

$$\ln(k) = \begin{cases} A_1 \ln(T) + \frac{B_1}{T} + \frac{C_1}{T^2} + D_1 & T \in I_1 \\ A_2 \ln(T) + \frac{B_2}{T} + \frac{C_2}{T^2} + D_2 & T \in I_2 \end{cases} \quad (\text{A I-2})$$

Viscosité dynamique :

$$\ln(\mu) = \begin{cases} E_1 \ln(T) + \frac{F_1}{T} + \frac{G_1}{T^2} + H_1 & T \in I_1 \\ E_2 \ln(T) + \frac{F_2}{T} + \frac{G_2}{T^2} + H_2 & T \in I_2 \end{cases} \quad (\text{A I-3})$$

Où k est la conductivité thermique, μ la viscosité dynamique, T la température, I_1 et I_2 les intervalles de définitions des paramètres $A_1/A_2/B_1/B_2/C_1/C_2/D_1/D_2/E_1/E_2/F_1/F_2/G_1/G_2$ des paramètres trouvés dans la littérature (annexe I.2).

2. Coefficients des conductivités thermiques et des viscosités dynamiques

Type de coefficients	Intervalle de température (K)		Coefficients de transport			
	Inférieur	Supérieur	A	B	C	D
H₂						
Viscosité	200	1000	0,74553182	43,555109	-3257,934	0,13556243
Viscosité	1000	5000	0,96730605	679,31897	-210251,79	-1,8251697
Conductivité	200	1000	1,0240124	297,09752	-31396,363	1,0560824
Conductivité	1000	5000	1,0611992	258,85783	6316,3191	0,79973205
O₂						
Viscosité	200	1000	0,6091618	-52,244847	-599,74009	2,0410801
Viscosité	1000	5000	0,72216486	175,50839	-57974,816	1,0901044
Conductivité	200	1000	0,77238828	6,9293259	-5900,8518	1,2202965
Conductivité	1000	5000	0,90875998	289,86028	-79180,433	0,068622859
N₂						
Viscosité	200	1000	0,62526577	-31,779652	-1640,7983	1,7454992
Viscosité	1000	5000	0,87395209	561,52222	-173948,09	-0,39335958
Conductivité	200	1000	0,85372829	105,18665	-12299,753	0,48299104
Conductivité	1000	5000	0,8850652	134,69656	-11386,42	0,23610008
H₂O						
Viscosité	373,2	1075	0,49966928	-697,84297	88274,722	3,0878979
Viscosité	1075	5000	0,5896333	-538,75152	54745,23	2,3409644
Conductivité	372,2	1075	1,1322991	-512,13867	99913,498	-0,52900911
Conductivité	1075	5000	0,50036257	-1719,4289	387590,61	4,755867
OH						
Viscosité	300	1000	0,76892924	-263,43285	24746,805	1,0326028
Viscosité	1000	5000	0,59502803	-467,37406	39767,529	2,4227902
Conductivité	300	1000	1,2335495	-93,048739	3844,0086	-1,5693877
Conductivité	1000	5000	0,54743881	-1206,0985	217314,87	4,0696759

Figure-A I-1 Coefficients des conductivités thermiques et des viscosités dynamiques.

Tirée de : Svehla (1995)

3. Détail des paramètres de l'équation de la conductivité thermique

$$f_{trans} = \frac{5}{2} \left[1 - \frac{2}{\pi} \frac{C_{v,rot}}{C_{v,trans}} \frac{A}{B} \right] \quad (\text{A I-4})$$

$$f_{rot} = \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \left[1 + \frac{2}{\pi} \frac{A}{B} \right] \quad (\text{A I-5})$$

$$f_{vib} = \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \quad (\text{A I-6})$$

$$A = \frac{5}{2} - \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \quad (\text{A I-7})$$

$$B = z_{rot} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{5}{3} \frac{C_{v,rot}}{R_u} + \frac{\rho D_{ii}}{\mu_i} \right) \quad (\text{A I-8})$$

$$C_{v,trans} = \frac{3}{2} R_u \quad (\text{A I-9})$$

$$z_{rot} = z_{rot}(298) \frac{F(298)}{F(T)} \quad (\text{A I-10})$$

Où $z_{rot}(298)$ est la valeur de rotation du nombre de collision à 298K, qui est définie dans le fichier de transport, et :

$$F(T) = 1 + \frac{\pi^{\frac{3}{2}}}{2} \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \frac{\varepsilon}{kT} + \pi^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{A I-11})$$

Pour une molécule linéaire :

$$C_{v,rot} = R_u \quad (\text{A I-12})$$

$$C_{v,vib} = C_v - \frac{5}{2} R_u \quad (\text{A I-13})$$

ANNEXE II

MÉCANISMES DE RÉACTION UTILISÉS

1. Cinétique chimique de Sandia

Mécanisme de réaction

ELEMENTS

H O N

END

SPECIES

H2 O2 H O OH HO2 H2O H2O2 N2

END

REACTIONS

H2+O2=2OH	1.7E13	0.000	47780.
H2+OH=H2O+H	1.17E09	1.3	3626.0
H+O2=OH+O	2.00E14	0.000	16800.
O+H2=OH+H	1.8E10	1.000	8826.
H+O2+M=HO2+M	2.10E18	-1.000	0.0
H2O/21/ H2/3.3/ O2/0.0/ N2/0.0/			
H+O2+O2=HO2+O2	6.7E19	-1.42	0.0
H+O2+N2=HO2+N2	6.7E19	-1.42	0.0
OH+HO2=H2O+O2	5.0E13	0.000	1000.
H+HO2=2OH	2.5E14	0.000	1900.
O+HO2=O2+OH	4.8E13	0.000	1000.
2OH=O+H2O	6.0E08	1.300	0.0
H2+M=H+H+M	2.23E12	0.5	92600.0
H2O/6/ H/2/ H2/3/			
O2+M=2O+M	1.85E11	0.500	95560.
H+OH+M=H2O+M	7.5E23	-2.600	0.
H2O/20/			
H+HO2=H2+O2	2.5E13	0.000	700.0
HO2+HO2=H2O2+O2	2.0E12	0	0.0
H2O2+M=OH+OH+M	1.3E17	0	45500.0

H2O2+H=HO2+H2	1.6E12	0	3800.0
H2O2+OH=H2O+HO2	1.0E13	0	1800.0
END			

Tiré de : Kee *et al.* (1985)

2. Cinétique chimique de Davis

Mécanisme de réaction

ELEMENTS

O H C N AR HE

END

SPECIES

H2 H

AR N2 HE

O OH HCO HO2

H2O CO O2 H2O2 CO2

END

REACTIONS

!

! Reactions of H2/O2

!

H+O2 = O+OH 2.644E+16 -0.6707 17041.00 !GRI3.0 * 1.00

O+H2 = H+OH 4.589E+04 2.700 6260.00 !GRI3.0 * 1.19

OH+H2 = H+H2O 1.734E+08 1.510 3430.00 !GRI3.0 * 0.80

OH+OH = O+H2O 3.973E+04 2.400 -2110.00 !GRI3.0 * 1.11

H+H+M = H2+M 1.780E+18 -1.000 0.00 !GRI3.0 * 1.78

H2/0.0/ H2O/0.0/ CO2/0.0/ AR/0.63/ HE/0.63/

H+H+H2 = H2+H2 9.000E+16 -0.600 0.00 !GRI3.0

H+H+H2O = H2+H2O 5.624E+19 -1.250 0.00 !GRI3.0 * 0.94

H+H+CO2 = H2+CO2 5.500E+20 -2.000 0.00 !GRI3.0

H+OH+M = H2O+M 4.400E+22 -2.000 0.00 !GRI3.0 * 2.00

H2/2.0/ H2O/6.30/ CO/1.75/ CO2/3.6/ AR/0.38/ HE/0.38/

O+H+M = OH+M 9.428E+18 -1.000 0.00 !86TSA/HAM * 2.00

H2/2.0/ H2O/12.0/ CO/1.75/ CO2/3.6/ AR/0.7/ HE/0.7/

O+O+M = O2+M 1.200E+17 -1.000 0.00 !GRI3.0

H2/2.4/ H2O/15.4/ CO/1.75/ CO2/3.6/ AR/0.83/ HE/0.83/

```

H+O2 (+M) = HO2 (+M)  5.116E+12  0.440      0.00 !00TROE -
! Based on M=N2 * 1.10

LOW/6.328E+19  -1.400  0.00/
TROE/0.5  1E-30  1E+30/
O2/0.85/  H2O/11.89/ CO/1.09/ CO2/2.18/ AR/0.40/ HE/0.46/ H2/0.75/
!O2/0.75/  H2O/12.0/ CO/1.2/ CO2/2.4/ AR/0.53/ HE/0.53/
!H+O2 (+M) = HO2 (+M)  4.651E+12  0.440      0.00 !00TROE -
! Based on M=AR
!LOW/7.490E+18  -1.200  0.00/
!TROE/0.5  1E-30  1E+30/
!H+O2 (+M) = HO2 (+M)  4.651E+12  0.440      0.00 !00TROE -
! Based on M=H2O
!LOW/5.753E+20  -1.400  0.00/                                !10xN2
!TROE/0.0 345.0 10 345.0 /                                !FSC
H2+O2 = HO2+H          5.916E+05  2.433  53502.00 !00MIC/SUT * 0.80

OH+OH (+M) = H2O2 (+M) 1.110E+14  -0.370      0.00 !88ZEL/EWI * 1.50

LOW /  2.010E+17  -0.584 -2293.00/      !Fit 88ZEL/EWI and 92BAU/COB
TROE/  0.7346   94.00 1756.00 5182.00 / !H2O=6xN2 88ZEL/EWI
H2/2.0/ H2O/6.00/ CO/1.75/ CO2/3.6/ AR/0.7/ HE/0.7/
!
! Reactions of HO2
!
HO2+H = O+H2O          3.970E+12  0.000      671.00 !GRI3.0
HO2+H = OH+OH          7.485E+13  0.000      295.00 !99MUE/KIM * 1.06
HO2+O = OH+O2          4.000E+13  0.000        0.00 !GRI3.0 * 2.00
HO2+OH = O2+H2O        2.375E+13  0.000     -500.00 !88KEY * 0.82
DUPLICATE
HO2+OH = O2+H2O        1.000E+16  0.000    17330.00 !95HIP/NEU
DUPLICATE
HO2+HO2 = O2+H2O2      1.300E+11  0.000    -1630.00 !90HIP/TRO
DUPLICATE
HO2+HO2 = O2+H2O2      3.658E+14  0.000   12000.00 !90HIP/TRO * 0.87

```

```

DUPLICATE
!
! Reactions of H2O2
!
H2O2+H = HO2+H2      6.050E+06    2.000    5200.00 !GRI3.0 * 0.50
H2O2+H = OH+H2O      2.410E+13    0.000    3970.00 !86TSA/HAM
H2O2+O = OH+HO2      9.630E+06    2.000    3970.00 !86TSA/HAM
H2O2+OH = HO2+H2O    2.000E+12    0.000     427.00 !95HIP/NEU
DUPLICATE
H2O2+OH = HO2+H2O    2.670E+41   -7.000   37600.00 !Refit95HIP/NEU
DUPLICATE                                     !2.2E14 MAX K
END

```

Tiré de : Davis *et al.* (2005)

3. Cinétique chimique de San Diego

Mécanisme de réaction

ELEMENTS

N AR HE H O C

END

SPECIES

N2	AR	HE	H	O2
OH	O	H2	H2O	HO2
H2O2	CO	CO2	HCO	CH3
CH	CH2O	T-CH2	S-CH2	C2H4
CH3O	C2H5	C2H6	CH	C2H2
C2H4OOH	OC2H3OOH	C2H3	CH2CHO	C2H4O
HCCO	CH2CO	C2H	CH2OH	CH3OH
CH3CHO	CH3CO	C2H5OH	CH2CH2OH	CH3CHOH
CH3CH2O	C3H4	C3H3	C3H5	C3H6
C3H8	I-C3H7	N-C3H7	C3H6OOH	OC3H5OOH
C4H10	PC4H9	SC4H9	C4H8	SC4H9O2
C4H8OOH1-3	NC4KET13			

END

REACTIONS

H+O2<=>OH+O	3.520e+16	-0.700	17069.79
H2+O<=>OH+H	5.060e+04	2.670	6290.63
H2+OH<=>H2O+H	1.170e+09	1.300	3635.28
H2O+O<=>2 OH	7.000e+05	2.330	14548.28
2 H+M<=>H2+M	1.300e+18	-1.000	0.00
AR/0.50/ HE/0.50/ H2/2.50/ H2O/12.00/ CO/1.90/ CO2/3.80/			
H+OH+M<=>H2O+M	4.000e+22	-2.000	0.00
AR/0.38/ HE/0.38/ H2/2.50/ H2O/12.00/ CO/1.90/ CO2/3.80/			
2 O+M<=>O2+M	6.170e+15	-0.500	0.00
AR/0.20/ HE/0.20/ H2/2.50/ H2O/12.00/ CO/1.90/ CO2/3.80/			
H+O+M<=>OH+M	4.710e+18	-1.000	0.00
AR/0.75/ HE/0.75/ H2/2.50/ H2O/12.00/ CO/1.90/ CO2/3.80/			
H+O2 (+M) <=>HO2 (+M)	4.650e+12	0.440	0.00


```

AR/0.70/ HE/0.70/ H2/2.50/ H2O/16.00/ CO/1.20/ CO2/2.40/ C2H6/1.50/
    LOW / 5.750e+19 -1.400 0.00 /
    TROE/ 0.5 1e-30 1e+30 /
HO2+H<=>2 OH 7.080e+13 0.000 294.93
HO2+H<=>H2+O2 1.660e+13 0.000 822.90
HO2+H<=>H2O+O 3.100e+13 0.000 1720.84
HO2+O<=>OH+O2 2.000e+13 0.000 0.00
HO2+OH<=>H2O+O2 7.000e+12 0.000 -1094.65
DUPLICATE
HO2+OH<=>H2O+O2 4.500e+14 0.000 10929.73
DUPLICATE
2 OH (+M) <=>H2O2 (+M) 9.550e+13 -0.270 0.00
AR/0.70/ HE/0.40/ H2/2.50/ H2O/6.00/ H2O2/6.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/
    LOW / 2.760e+25 -3.200 0.00 /
    TROE/ 0.57 1e+30 1e-30 /
2 HO2<=>H2O2+O2 1.030e+14 0.000 11042.07
DUPLICATE
2 HO2<=>H2O2+O2 1.940e+11 0.000 -1408.94
DUPLICATE
H2O2+H<=>HO2+H2 2.300e+13 0.000 7950.05
H2O2+H<=>H2O+OH 1.000e+13 0.000 3585.09
H2O2+OH<=>H2O+HO2 1.740e+12 0.000 1434.03
DUPLICATE
H2O2+OH<=>H2O+HO2 7.590e+13 0.000 7272.94
DUPLICATE
H2O2+O<=>HO2+OH 9.630e+06 2.000 3991.40
END

```

Tiré de : UCSD (2016)

4. Cinétique chimique de LLNL

Mécanisme de réaction

```

! Connaire, M. O., Curran, H J., Simmie, J. M., Pitz, W. J. and
! Westbrook, C.K.,
! "A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation",
! International Journal of Chemical Kinetics, 36:603-622,
! 2004: UCRL-JC-152569.
! UCRL-WEB-208393
! Review and release date: December 3, 2004.
! 11/19/04 version 1b: WJP: eliminated efficiencies for co,
! co and hydrocarbon
! species. These caused errors from the Chemkin interpreter.
! 4/16/04 version 1a
!
elements
h c o n ar
end
species

```

```

h          h2          o          o2          oh
h2o        n2          ho2         h2o2         ar
end

reactions                                cal/mole
  h+o2 = o+oh      1.915E+14   0.00  1.644E+04
              rev /   5.481E+11   0.39 -2.930E+02 /
  o+h2 = h+oh      5.080E+04   2.67  6.292E+03
              rev /   2.667E+04   2.65  4.880E+03 /
  oh+h2 = h+h2o    2.160E+08   1.51  3.430E+03
              rev /   2.298E+09   1.40  1.832E+04 /
  o+h2o = oh+oh    2.970E+06   2.02  1.340E+04
              rev /   1.465E+05   2.11 -2.904E+03 /
  h2+m = h+h+m     4.577E+19  -1.40  1.044E+05

```

```

      rev / 1.146E+20 -1.68 8.200E+02 /
h2/2.5/ h2o/12.0/
o2+m = o+o+m      4.515E+17 -0.64 1.189E+05
      rev / 6.165E+15 -0.50 0.000E+00 /
h2/2.5/ h2o/12.0/ ar/0.83/
oh+m = o+h+m      9.880E+17 -0.74 1.021E+05
      rev / 4.714E+18 -1.00 0.000E+00 /
h2/2.5/ h2o/12.0/ ar/0.75/
h2o+m = h+oh+m     1.912E+23 -1.83 1.185E+05
      rev / 4.500E+22 -2.00 0.000E+00 /
h2/0.73/ h2o/12.0/ ar/0.38/
h+o2(+m) = ho2(+m) 1.475E+12 0.60 0.000E+00
!      rev / 3.090E+12 0.53 4.887E+04 /
      low / 3.4820E+16 -4.1100E-01 -1.1150E+03 /
troee/0.5 1.0000E-30 1.0000E+30 1.0000E+100 /
h2/1.3/ h2o/14.0/ ar/0.67/
ho2+h = h2+o2     1.660E+13 0.00 8.230E+02
      rev / 3.164E+12 0.35 5.551E+04 /
ho2+h = oh+oh     7.079E+13 0.00 2.950E+02
      rev / 2.027E+10 0.72 3.684E+04 /
ho2+o = oh+o2     3.250E+13 0.00 0.000E+00
      rev / 3.252E+12 0.33 5.328E+04 /
ho2+oh = h2o+o2   2.890E+13 0.00 -4.970E+02
      rev / 5.861E+13 0.24 6.908E+04 /
h2o2+o2 = ho2+ho2 4.634E+16 -0.35 5.067E+04
      rev / 4.200E+14 0.00 1.198E+04 /
DUPLICATE
h2o2+o2 = ho2+ho2 1.434E+13 -0.35 3.706E+04
      rev / 1.300E+11 0.00 -1.629E+03 /
DUPLICATE
h2o2(+m) = oh+oh(+m) 2.951E+14 0.00 4.843E+04
!      rev / 3.656E+08 1.14 -2.584E+03 /
      low / 1.202E+17 0.00 45500. /
      troee /0.5 1.0e-30 1.0e+30 1.0e+100/
      h2/2.5/ h2o/12.0/ ar/0.64/

```

```

h2o2+h = h2o+oh    2.410E+13    0.00    3.970E+03
               rev /    1.269E+08    1.31    7.141E+04 /
h2o2+h = h2+ho2     6.025E+13    0.00    7.950E+03
               rev /    1.041E+11    0.70    2.395E+04 /
h2o2+o = oh+ho2     9.550E+06    2.00    3.970E+03
               rev /    8.660E+03    2.68    1.856E+04 /
h2o2+oh = h2o+ho2      1.000E+12    0.00    0.000E+00
               rev /    1.838E+10    0.59    3.089E+04 /
DUPLICATE
h2o2+oh = h2o+ho2      5.800E+14    0.00    9.557E+03
               rev /    1.066E+13    0.59    4.045E+04 /
DUPLICATE
end
c@F

```

Tiré de : Connaire *et al.* (2004)

ANNEXE III

RÉSULTATS COMPLÉMENTAIRES

1. Cinétique chimique de LLNL avec les propriétés de San Diego

Les résultats obtenus en changeant les propriétés de transport et de thermodynamique sont illustrés aux Figures III-1 et III-2. Les Figures III-1 et III-2 représentent respectivement l'évolution de la fraction molaire de OH entre 2.5 et 10 ms et entre 12.5 et 20 ms par pas de temps de 2.5 ms pour la cinétique chimique de LLNL (images du haut) et pour la cinétique chimique de LLNL mais avec les fichiers de thermodynamiques et de transport de San Diego (images du bas), référencée en tant que "LLNLwSD" .

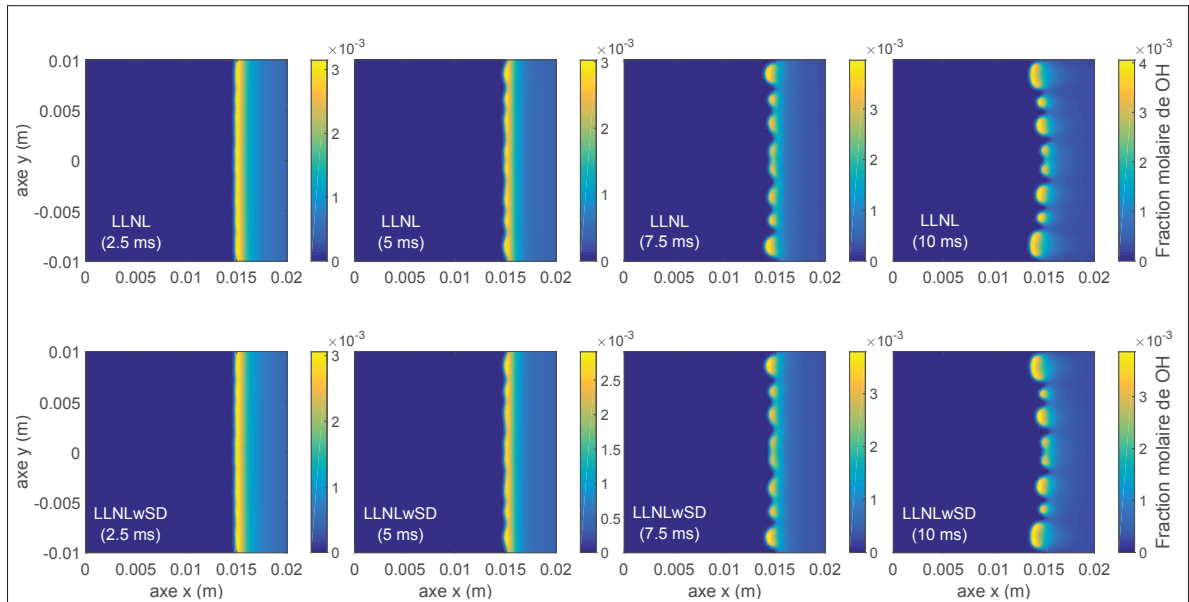


Figure-A III-1 Évolution de la fraction molaire de OH entre 2.5 et 10 ms pour la cinétique chimique de LLNL (images du haut) et LLNLwSD (images du bas)

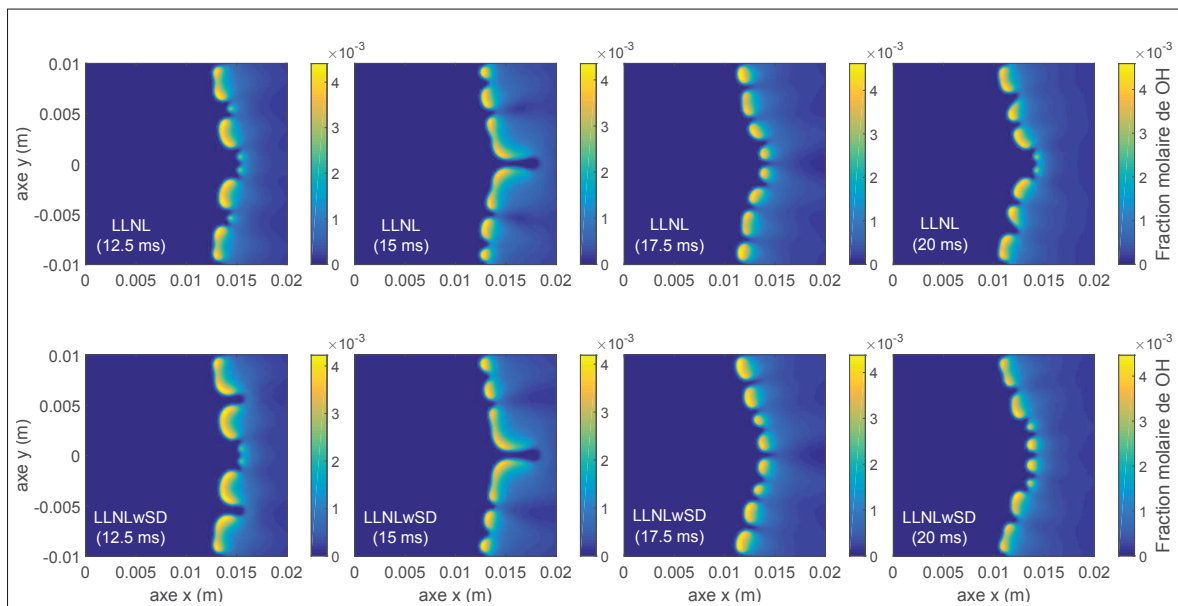


Figure-A III-2 Évolution de la fraction molaire de OH entre 12.5 et 20 ms pour la cinétique chimique de LLNL (haut) et LLNLwSD (bas)

2. Comparaison San Diego Dirichlet et San Diego Neumann entre 2.5 et 10 ms

La Figure III-3 représente l'évolution de la fraction molaire de OH entre 2.5 et 10 ms pour la cinétique chimique de San Diego avec la condition de sortie de Dirichlet (graphiques du haut, lecture de gauche à droite) et avec la condition de sortie de Neumann (graphiques du bas, lecture de gauche à droite).

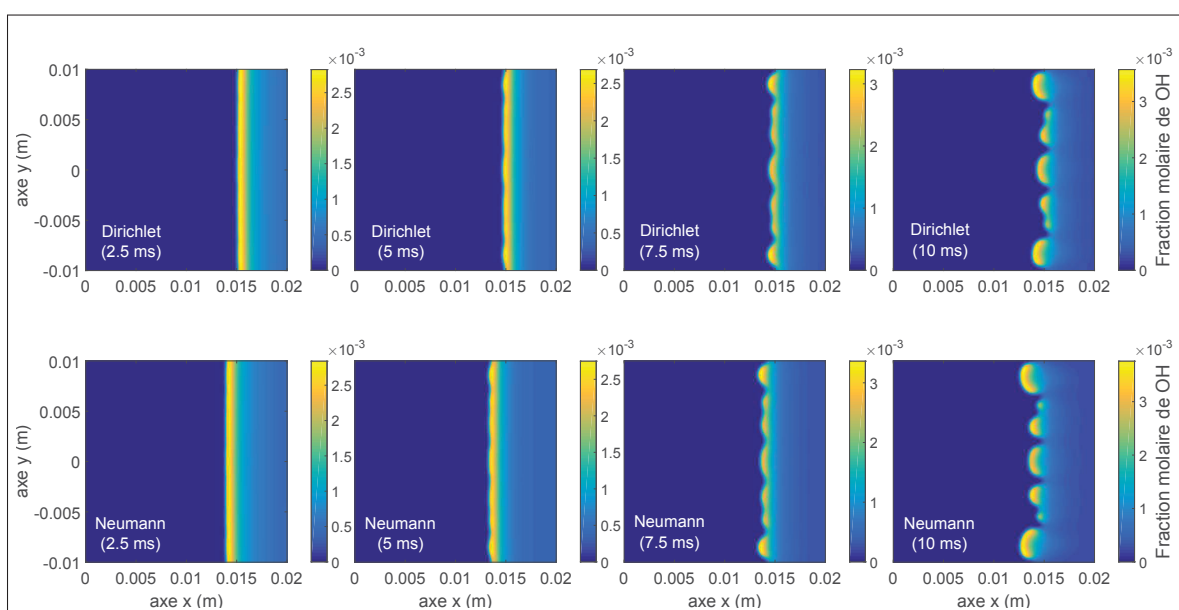


Figure-A III-3 Évolution de la fraction molaire de OH pour San Diego Dirichlet (haut) et San Diego Neumann (bas)

3. Amplitudes de perturbation multipliées par deux

La Figure III-4 représente l'évolution de la fraction molaire de OH entre 2.5 et 20 ms, par intervalle de temps de 2.5 ms (lecture de gauche à droite et de haut en bas) pour la cinétique chimique de San Diego à 1 atmosphère, avec la loi de mélange basée sur la fraction massique ainsi que la condition de sortie de type Dirichlet.

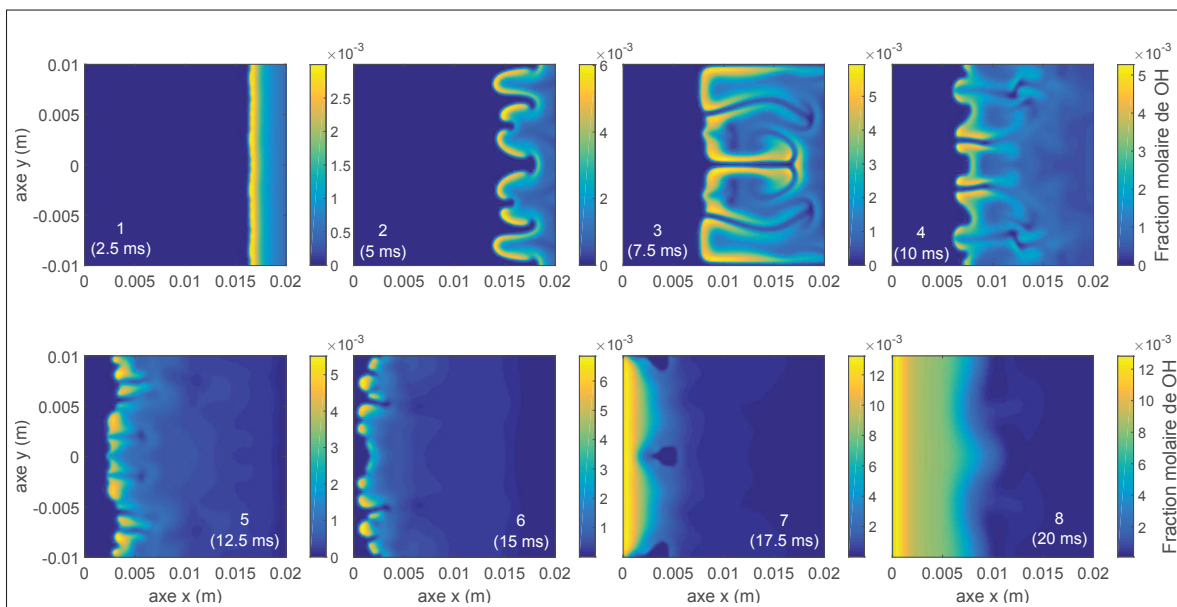


Figure-A III-4 Évolution de la fraction molaire de OH pour San Diego B100

BIBLIOGRAPHIE

- Altantzis, C., Frouzakis, C., Tomboulides, A., Kerkemeier, S. & Boulouchos, K. (2011). Detailed numerical simulations of intrinsically unstable two-dimensional planar lean premixed hydrogen/air flames. *Proceedings of the combustion institute*, 33(1), 1261 - 1268. doi : <https://doi.org/10.1016/j.proci.2010.06.082>.
- BMW. (2017). BMW 7 Series Hydrogen 7. [Online; accessed 3-May-2017], Repéré à <http://www.bmwarchive.org/e-code/e68.html>.
- CD-Adpaco. STAR-CCM+ (Version 11.02.010). Repéré à <http://mdx.plm.automation.siemens.com>.
- Chandrasekhar, S. (2013). *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. Dover Publications. Repéré à <https://books.google.ca/books?id=Mg3CAgAAQBAJ>.
- Clanet, C. et Searby, G. (1998). First Experimental Study of the Darrieus-Landau Instability. *Physical review letters*, 80, 3867-3870. doi : 10.1103/PhysRevLett.80.3867.
- Connaire, M. O., Curran, H. J., Simmie, J. M., Pitz, W. J. & Westbrook, C. (2004). A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *International journal of chemical kinetics*, 36, 603-622.
- Darrieus, G. (1938). Propagation d'un front de flamme. *La technique moderne and congrès de mécanique appliquée paris*.
- Davis, S., Joshi, A., Wang, H. & Egolfopoulos, F. (2005). An optimized kinetic model of h₂/co combustion. *Proceedings of the combustion institute*, 30, 1283-1292.
- Day, M., Bell, J., Bremer, P.-T., Pascucci, V., Beckner, V. & Lijewski, M. (2009). Turbulence effects on cellular burning structures in lean premixed hydrogen flames. *Combustion and flame*, 156(5), 1035 - 1045. doi : <http://doi.org/10.1016/j.combustflame.2008.10.029>.
- Dieges, P. (1974). Vaporization of exhaust products in hydrogen-oxygen engine. US Patent 3 844 262.
- Glassman, I., Yetter, R. & Glumac, N. (2014). *Combustion*. Elsevier Science. Repéré à <https://books.google.ca/books?id=ILJZAwwAAQBAJ>.
- Hinds, W. C., Ashley, A., Kennedy, N. J. & Bucknam, P. (2002). Conditions for cloud settling and rayleigh-taylor instability. *Aerosol science and technology*, 36(12), 1128-1138. doi : 10.1080/02786820290108449.
- Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. & Bird, R. B. (1964). *The molecular theory of gases and liquids*. Wiley-Interscience. Repéré à <http://ca.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0471400653.html>.

- Kadowaki, S., Kim, S. & Pitsch, H. (2005a). The dynamics of premixed flames propagating in non-uniform velocity fields : Assessment of the significance of intrinsic instabilities in turbulent combustion. *Annual research briefs*, 325–336.
- Kadowaki, S., Yanagioka, T., Yamazaki, W. & Kobayashi, H. (2015). Intrinsic instability of three-dimensional premixed flames under low- and high-temperature conditions : Effects of unburned-gas temperature on hydrodynamic and diffusive-thermal instabilities. *Combustion science and technology*, 187(8), 1167-1181. doi : 10.1080/00102202.2015.1019622. cited By 0.
- Kadowaki, S., Suzuki, H. & Kobayashi, H. (2005b). The unstable behavior of cellular premixed flames induced by intrinsic instability. *Proceedings of the combustion institute*, 30(1), 169 - 176. doi : <https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.07.041>.
- Kee, R., Grcar, J., Smooke, M. & Miller, J. (1985). PREMIX : a FORTRAN program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames.
- Kishore, V. R., Ravi, M. & Ray, A. (2011). Adiabatic burning velocity and cellular flame characteristics of h₂–co–co₂–air mixtures. *Combustion and flame*, 158(11), 2149 - 2164. doi : <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.03.018>.
- Landau, L. (1944). On theory of slow combustion. *Acta physicochimica u.r.s.s.*, 19, 77–85.
- Law, C.K. et Sung, C. (2000). Structure, aerodynamics, and geometry of premixed flamelets. *Progress in energy and combustion science*, 26(4–6), 459 - 505. doi : [http://dx.doi.org/10.1016/S0360-1285\(00\)00018-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0360-1285(00)00018-6).
- Linan, A. et Williams, F. (1993). *Fundamental aspects of combustion*. Oxford University Press.
- Markstein, G. (1964). *Nonsteady flame propagation*. MacMillan.
- Matalon, M., Cui, C. & Bechtold, J. K. (2003). Hydrodynamic theory of premixed flames : effects of stoichiometry, variable transport coefficients and arbitrary reaction orders. *Journal of fluid mechanics*, 487, 179–210. doi : 10.1017/S0022112003004683.
- Matalon, M. (2011). *Flame instabilities*. Princeton.
- Michelson, D.M. et Sivashinsky, G. (1977). Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames—ii. numerical experiments. *Acta astronautica*, 4(11), 1207 - 1221. doi : [http://dx.doi.org/10.1016/0094-5765\(77\)90097-2](http://dx.doi.org/10.1016/0094-5765(77)90097-2).
- Michelson, D.M. et Sivashinsky, G. (1982). Thermal-expansion induced cellular flames. *Combustion and flame*, 48, 211 - 217. doi : [http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180\(82\)90128-6](http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180(82)90128-6).
- Mitani, T. et Williams, F. (1980). Studies of cellular flames in hydrogen/oxygen/nitrogen mixtures. *Combustion and flame*, 39(2), 169 - 190. doi : [http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180\(80\)90015-2](http://dx.doi.org/10.1016/0010-2180(80)90015-2).

- Nath, A. (2013). What is the difference between implicit and explicit unsteady simulation approaches? Repéré à https://theesteveportal.plm.automation.siemens.com/articles/en_US/FAQ/What-is-the-difference-between-implicit-and-explicit-unsteady-simulation-approaches.
- Ouimette, P. et Seers, P. (2009). Numerical comparison of premixed laminar flame velocity of methane and wood syngas. *Fuel*, 88, 528–533.
- Patnaik, G., Kailasanath, K., Oran, E. & Laskey, K. (1989). Detailed numerical simulations of cellular flames. *Symposium (international) on combustion*, 22(1), 1517 - 1526. doi : [http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784\(89\)80162-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0082-0784(89)80162-6).
- Poling, B., Prausnitz, J. & O'Connell, J. (2001). *Properties of gases and liquids* (éd. 5). McGraw-Hill Education : New York, Chicago, San Francisco, Athens, London, Madrid, Mexico City, Milan, New Delhi, Singapore, Sydney, Toronto.
- Rastigejev, Y. et Matalon, M. (2006). Numerical simulation of flames as gas-dynamic discontinuities. *Combustion theory and modelling*, 10(3), 459-481. doi : 10.1080/13647830500463502.
- Reaction Design. Reaction Design (Version 17.2). Repéré à <http://www.reactiondesign.com>.
- Regele, J., Knudsen, E., Pitsch, H. & Blanquart, G. (2013). A two-equation model for non-unity lewis number differential diffusion in lean premixed laminar flames. *Combustion and flame*, 160, 240–250.
- Renner, T. (2007). *Quantities, units and symbols in physical chemistry*. The Royal Society of Chemistry. doi : 10.1039/9781847557889.
- Sánchez, A. L. (2017). Fluid Mechanics. Repéré à <http://fluidosuc3m.es/research/combustion/>.
- Svehla, R. A. (1995). *Transport coefficients for the nasa lewis chemical equilibrium program* (Rapport n°4647).
- Štrubelj, L. et Tiselj, I. (2008). Numerical simulation of rayleigh-taylor instability with two-fluid model and interface sharpening. *Asme 2008 fluids engineering division summer meeting collocated with the heat transfer, energy sustainability, and 3rd energy nano-technology conferences*.
- Turns, S. (1996). *An introduction to combustion : concepts and applications*. McGraw-Hill. Repéré à <https://books.google.fr/books?id=k-ZSAAAAMAAJ>.
- UCSD. [[Online; accessed January-2017]]. (2016). Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. Repéré à <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>.
- Warnatz, J., Maas, U. & Dibble, R. W. (2006). *Combustion*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Repéré à <http://www.springer.com/br/book/9783540259923>.

- Yamane, K. et Takiguchi, M. (2009). Hydrogen fuel ice bus developed by tcu. *Journal of the hydrogen energy systems society of japan*, 34(2), 41–46.
- Yu, J. (2013). *Numerical study of cellular instability in burner stabilized adiabatic laminar premixed flames*. (Thèse de doctorat, Lund University, Division of Fluid Mechanics, Department of Energy Sciences Faculty of Engineering LTH, Lund University 22100 Lund, Sweden). Repéré à Chapter 5.
- Yuan, J., Ju, Y. & Law, C. K. (2005). Coupled hydrodynamic and diffusional-thermal instabilities in flame propagation at subunity lewis numbers. *Physics of fluids*, 17(7), 074106. doi : 10.1063/1.1964845.
- Yuan, J., Ju, Y. & Law, C. K. (2006). Pulsating and hydrodynamic instabilities at large lewis numbers. *Combustion and flame*, 144(1–2), 386 - 397. doi : [https ://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.08.002](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.08.002).
- Yuan, J., Ju, Y. & Law, C. K. (2007). On flame-front instability at elevated pressures. *Proceedings of the combustion institute*, 31(1), 1267 - 1274. doi : [https ://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.180](https://doi.org/10.1016/j.proci.2006.07.180).