

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE DE SAAD DAHLEB BLIDA
INSTITUT D'AERONAUTIQUE ET DES ETUDES SPATIALES**

Thème

**ETUDE NUMERIQUE D'ECOULEMENTS TURBULENTS REACTIFS,
SIMULATION NUMERIQUE DES GRANDES ECHELLES POUR LES
ECOULEMENTS TURBULENTS REACTIFS EN REGIME DE PREMELANGE**

Présenté par : **Azzazen Mohamed**

Pour obtenir le grade de: **Docteur en Aéronautique** Discipline/Spécialité: **Propulsion**

Membres du jury

Mme Amina Benkhada,	Professeur, Université de blida 1	Président du jury
Mr Salah Boukraa,	Professeur, Université de blida1	Directeur de thèse
Mr Tahar Rezoug,	Professeur, Université de blida 1	Examineur
Mr Lakhdar Gacem,	Professeur, Université de Djelfa	Examineur
Mr Mihoub Medkour	MCA , Université de Tissemsilt	Examineur
Mr Hammou AEK Djilali,	MCA, Université Ammar Telidji Laghouat	Examineur

Remerciements

C'est avec une profonde affliction et une immense gratitude que je rédige ces mots pour rendre hommage à Monsieur Zine Eddine Youbi, mon promoteur, décédé récemment.

Monsieur Youbi était un mentor et une source d'inspiration inestimable. Dès l'entame de mon doctorat, il a fait preuve d'une disponibilité constante, prodiguant conseils et soutien même dans les moments les plus éprouvants. Je lui serai éternellement reconnaissant pour tout ce qu'il m'a apporté.

Cette thèse a été réalisée au sein de l'Institut d'Aéronautique et des Etudes Spatiales (IAES), affilié à l'Université Saad Dahleb de Blida. Je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance à Madame Amina Benkhada, Directrice de l'IAES, d'avoir accepté de présider mon jury de thèse ainsi que pour son soutien et ses conseils son aide précieuse ont été remarquables tout au long de ce travail

Je remercie également Monsieur Mohand Lagha, directeur adjoint en charge de la post-graduation de l'IAES, ainsi que l'ensemble du personnel pédagogique et administratif de l'IAES pour leur soutien et leur bienveillance tout au long de mon parcours doctoral.

Je voudrais adresser mes plus vifs remerciements à mon directeur de thèse, Monsieur Salah Boukraa. Sa rigueur scientifique, ses conseils avisés et son encouragement constant ont été déterminants pour la réussite de cette thèse. Je suis particulièrement reconnaissant pour sa patience et sa disponibilité, qui m'ont permis de progresser et de surmonter les obstacles rencontrés au cours de mon travail de recherche.

Je remercie chaleureusement Monsieur Tahar Rezoug, Monsieur Lakhdar Gacem, Monsieur Mihoub Medkour et Monsieur Hammou AEK Djilali d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ma thèse. Leurs critiques constructives et leurs suggestions précieuses ont contribué à améliorer de manière notable la qualité de mon travail de recherche.

Une thèse expérimentale ne peut aboutir sans le soutien d'une équipe de recherche compétente et dévouée. Je remercie tout particulièrement Madame Isabelle Sochet, professeur et directrice de la Recherche à l'ENSIB de Bourges, pour avoir été un maître de stage hors pair. Sa disponibilité, sa patience et ses conseils avisés m'ont permis d'approfondir ma compréhension de la physique des flammes et d'améliorer significativement mon travail de recherche.

Cette thèse n'aurait pu se concrétiser sans l'aide et le soutien indéfectible de ma famille et mes amis tout au long de ces années de doctorat. Leur encouragement et leur présence ont été une source de motivation inestimable pour moi. Je leur suis profondément reconnaissant pour tout ce qu'ils ont apporté.

Nomenclature

Lettres Latines

- [A] : Concentration [moles/m³].
- A_{rrh} : Constante d'Arrhenius.
- C_p : Capacité calorifique de l'espèce s [KJ./Kg.°K]
- C_v : Capacité calorifique à volume constant [KJ./Kg.°K]
- d : Dimension caractéristique [m].
- D_s : Coefficient de diffusion de l'espèce s [m²/s ou cm²/s].
- D_g : Coefficient de diffusion globale [m²/s ou cm²/s].
- D_{th} : Diffusivité thermique des gaz frais [m²/s].
- E : Excès d'air.
- E_a : Energie d'activation [J/mol].
- E_c : Energie cinétique de l'ensemble du système [Joule].
- E_p : Energie potentielle dans le champ pesanteur [Joule].
- F : Flux des particules [mol/s].
- h_f[°] : Enthalpie de formation standard [J/mole].
- h_s : Enthalpie de l'espèce s.
- h : Enthalpie massique
- K_d : Constante de vitesse directe.
- K_{eq} : Constante d'équilibre.
- K_i : Constante de vitesse indirecte.
- l : Hauteur [m].
- L : Longueur de Markstein dans les gaz brûlés et les gaz frais [m]
- Le : Nombre de Lewis
- LII : Limite inférieure d'inflammabilité
- LSI : Limite supérieure d'inflammabilité
- LS : Vitesse de flamme laminaire des gaz frais [m/s]
- m : Débit massique [g/s]
- M_i : masse molaire des espèce [kg/mole]
- M_m : masse molaire du mélange [kg/mole]
- M : Nombre de Mach
- Ma : Nombre de Markstein
- m : Masse [kg].
- M_s : Masse molaire de l'espèce s [kg/mole].
- n : Quantité de matière [moles].
- N_A : Nombre d'Avogadro [mol⁻¹].
- m : Débit massique [g/s]
- M_i : masse molaire des espèce [kg/mole]
- M_m : masse molaire du mélange [kg/mole]
- M : Nombre de Mach
- Ma : Nombre de Markstein

P	: Pression [$\text{g}/\text{m} \cdot \text{s}^2$]
r	: Rayon [m]
R	: Constante universelle des gaz parfaits [$\text{J}/\text{mol} \cdot \text{K}$].
R_e	: Nombre de Reynolds.
S	: Entropie massique [$\text{J}/\text{kg} \cdot \text{K}$].
s	: Rapport stœchiométrique de masse.
S_l	: Vitesse laminaire de la flamme [m/s].
T	: Temps [s]
T	: Température [$^\circ\text{K}$]
T_{eb}	: Température d'ébullition [$^\circ\text{K}$]
T_u	: Température des gaz frais [$^\circ\text{K}$]
T_b	: Température des gaz brûlés [$^\circ\text{K}$].
u	: Vitesse d'injection [m/s].
U	: Énergie interne [Joule].
V	: Volume [m^3].
W	: Travail fourni au système [Joule].
Y_s	: Fraction molaire de l'espèce s.
z_f	: Fraction massique du carburant.
z_s	: Fraction massique de l'espèce s.

Lettres Grecques

α	: Dilution.
γ	: Rapport des capacités calorifiques [CP/CV].
ε	: Énergie d'attraction moléculaire [Joule].
μ	: Viscosité dynamique [$\text{Pa} \cdot \text{s}$].
ρ	: Masse volumique [kg/m^3].
σ	: Paramètre de Lennard [Å].
τ	: Tenseur de Reynolds [$\text{kg}/\text{m} \cdot \text{s}$].
ϕ	: Facteur de richesse.
ω_F	: Taux production Fuel [$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$].
ω_i	: Taux de réaction [$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$].
ω_T	: Taux de dégagement de chaleur [$\text{kg}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$].
ψ	: Concentration [mol/m^3]
ω	: Vitesse globale de réaction [mol/s]
Ω_i	: taux de réaction de l'espèce i
Ω	: Fonction ou potentiel de Lennard-Jones.
∂	: partielle.
∇	: Opérateur Laplacien.
v'	: Coefficient stœchiométrique des réactifs.
v''	: Coefficient stœchiométrique des produits.
$\alpha\beta$: Ordres partielles.

- ξ : Avancement de la réaction.
 λ : Conductivité thermique [W/m.°K]
 μ : Viscosité du fluide [Pa/s]
 ν : Viscosité cinématique [m²/s]
 σ : Rapport d'expansion
 δ_R : épaisseur de la zone réactive dans la flamme prémélangée laminaire plane
 δ : Épaisseur de la flamme [mm].
 ε : Taux de dissipation [m²/s³]

Indice.

- f :Gaz frais
 i ; Inflammation Initial
 K :Kolmogorov
 L : Laminaire
 l : Indice gaz frais.
 S : Spatiale
 T : Turbulent

Listes des Figures.

Figure 0.1 Variation de température au cours d'une combustion.	15
Figure 0.2 Evolution de la concentration en fonction de la richesse.	17
Figure 0.3 Classification des types de flammes.	17
Figure 0.4 Schéma d'une flamme pré-mélangée et non pré-mélangée.	18
Figure 0.5 Structure des flammes pré-mélangée et de diffusion.	18
Figure 0.6 Schéma d'une flamme de diffusion.	19
Figure 2.1 Photo de l'installation expérimentale.	29
Figure 2.2 Photo vérin -tronçon	30
Figure 2.3 Vue d'ensemble de dispositif de vidange.	31
Figure 2.4 Parois de tronçon	33
Figure 2.5 Parois de tronçon	34
Figure 2.6 Dispositif expérimental.	34
Figure 2.7 Dispositif de visualisation	36
Figure 3.1 Hauteur et l'écoulement d'une flamme / Vitesse d'écoulement	39
Figure 3.2 Dispositif de visualisation	44
Figure 3.3 Schéma de dispositif expérimental	46
Figure 3.4 Schéma présentatif de phénomène de diffusion.	48
Figure 3.5 Schéma présentatif de phénomène de diffusion.	50
Figure 3.6 Schéma présentatif de phénomène de diffusion.	51
Figure 3.7 la Discrétisation 2d et les points singuliers	56
Figure 3.8 la Discrétisation 2d et les points singuliers	57
Figure 4.1 Mécanisme de combustion par tranches.	64

Figure 4.2 Mécanisme de délitation de combustion par tranches.	65
Figure 4.3 Mécanisme des tranches.	65
Figure 5.1 Les résidus.	69
Figure 5.2 (a) Diffusion de d'oxygène O ₂	74
FIGURE 5.3 (B) Diffusion de propane C ₃ H ₈	74
Figure 5.4 (c) Diffusion de d'oxygène C ₃ H ₈ et de (O ₂) dans le cas 1	74
Figure 5.5 (a) Diffusion de propane C ₃ H ₈	76
Figure 5.6 (b) Diffusion de propane O ₂	76
Figure 5.7 (c) Diffusion de O ₂ , C ₃ H ₈ 2 ème cas.	76
Figure 5.8 Influence de la gravité	78
Figure 5.9 Evolution de coefficient de diffusion	79
Figure 5.10 Evolution de la pression de combustion.....	82
Figure 5.11 Evolution de température de combustion.	83
Figure 5.12 Evolution de la vitesse de propagation de la flamme	83

Listes des Tableaux

Tableau 0.1 Avantages et des inconvénients des types de flammes.....	20
Tableau 3-1 Configuration expérimentale.	45
Tableau 3-2 Ordre de grandeur coefficient de diffusion en(m ² /s).	58
Tableau 3-3 Ordre de grandeur coefficient de diffusion en (m ² /s)..	58
Tableau 3-4 Vitesse moléculaire moyenne et coefficient de diffusion.....	59
Tableau 3-5 Caractéristiques de l'hydrogène et de carbone.	60
Tableau 3-6 Coefficient de diffusion de propane (C ₃ H ₈) à T=298.15.	60
Tableau 3-7 Le volume de diffusion pour quelques atomes et molécules..	61
Tableau 3-8 Le coefficient de diffusion binaire.....	61
Tableau 3-9 les coefficients de diffusion de chaque espèce.	62
Tableau 5-1 Vitesse moléculaire moyenne et coefficient de diffusion.....	73

TABLE DES MATIERES

Remerciements	1
Nomenclature	2
Listes des figures.....	4
Listes des tableaux	5
Resume :	8
Introduction	10
Chapitre 1. Generalites et etat de l'art.....	14
1. Generalites et etat de l'art	14
1.1. Generalites	14
1.1.1 Différents types de combustion.....	15
1.1.2 Nature et le nombre de réactifs :.....	16
1.1.3 Modes de propagation.....	20
1.2 Les principaux aspects de simulation	23
1.3 Etat de l'art	25
chapitre 2. Montage experimental.....	27
Montage experimental	27
2.1 Introduction.....	27
2.2 Description générale :.....	28
2.2.1 Présentation du tube	29
2.2.2 L'amorçage :	31
2.2.3 Mesures de l'onde de pression.....	31
2.3 PROCESSUS EXPERIMENTAL	33
2.3.1 Visualisation.....	35
2.3.2 Premier principe.....	37
2.3.3 Second principe.....	38
chapitre 3. Modelisation de l'ecoulement reactifs	39
3 Modelisation de l'ecoulement reactif :.....	39
3.1 Gradient de réactivité	39
3.1.1 Matériels et méthodes	39
3.1.2 Modèle mathématique:.....	39
3.1.3 Mécanismes de formation des gradients de réactivité	43
3.1.4 Diffusion moléculaire	43
Modelisation de la combustion par tranche.....	63
4.1.1 Introduction.....	63
4.1.2 Modélisation combustion par tranches	63
4.1.3 Mécanisme de combustion par tranches	64

4.1.4	Calcul des paramètres thermodynamiques.....	64
chapite 5. Resultats et interpretations		69
Resultats et interpretations		69
5.1	Convergence.....	69
5.2	Validation des résultats	69
5.2.1	Répartition des espèces au cours de temps	70
5.3	Résultats.....	70
5.3.1	Résultats de la simulation :	71
5.3.2	Compatibilité des temps de diffusion avec la loi de fick	71
5.3.3	Influence de la densité sur la diffusion :	73
5.3.4	Influence de la gravité:.....	77
5.3.5	Influence de la température :.....	78
Conclusion et perspectives		84
References.		86
Annexe 1:.....		93
Principe de modelisation :		93
Annexe 2:.....		98
Mecanisme de combustion par tranches.....		98
Annexe 3:.....		100
Coefficients de sensibilite.....		100
Annexe 4:.....		102
Proprietes des gaz.		102
Annexe 5:.....		103
Proprietes du propane (C ₃ H ₈).		103
Annexe 6:.....		105
Proprietes du propane (C ₃ H ₈).....		105
Annexe 7:.....		107
Limites d inflammabilites.....		107
annexe 8:.....		109
flash points for common fuels.....		109

Résumé :

On suppose généralement, parfois implicitement, que le nuage gazeux (formé à la suite d'un rejet accidentel, par exemple) qui explose est uniforme et homogène. Mais, en pratique, le nuage résulte souvent d'un rejet accidentel d'une substance chimique dans l'air qui conduit à un mélange gazeux non uniforme et donc à des gradients de concentration, ou de pression, ou de température. Ces gradients correspondent à la répartition du degré de réactivité, ce qui entraîne une aptitude plus ou moins grande à réagir. Ces gradients ont une influence sur les conséquences de l'explosion, qui fait l'objet de ce travail sur la combustion dans des milieux réactifs en situation confinée afin de pouvoir mieux contrôler l'ensemble des paramètres physiques et de comprendre la physique des explosions car les travaux menés à ce jour montrent que la nonuniformité d'un mélange présentant un gradient de concentration est susceptible d'avoir une incidence considérable sur la dynamique de l'explosion et peuvent être étudiés avec finesse. En effet, la flamme accélère et augmente de pression lorsqu'elle traverse des gradients. Mots clés : L'écoulement réactif, Simulation Numérique Des Grandes Échelles, Turbulence, flamme de prémélange, combustion.

Abstract:

It is generally assumed, sometimes implicitly, that the gaseous cloud (formed following an accidental release, for example) that explodes is uniform and homogeneous. However, in practice, the cloud often results from an accidental release of a chemical substance into the air, which leads to a non-uniform gaseous mixture and therefore to gradients of concentration, pressure, or temperature. These gradients correspond to distributions of the degree of reactivity and therefore a greater or lesser ability to react. These gradients have an influence on the consequences of the explosion, which is the subject of this work on combustion in reactive media in confined situations in order to be able to better control the entire set of physical parameters and understand the physics of explosions because the work carried out to date shows that the non-uniformity of a mixture with a concentration gradient is likely to have a considerable impact on the dynamics of the explosion and can be studied in detail. In fact, a flame acceleration mechanism accompanied by an increase in pressure appears when the flame crosses gradients.

ملخص:

يُفترض عمومًا، وأحيانًا ضمناً، أن السحابة الغازية التي تنفجر تكون متجانسة وموحدة. ولكن في الواقع، غالبًا ما تنتج السحابة عن إطلاق غير مقصود لمادة كيميائية في الهواء مما يؤدي إلى خليط غازي غير متجانس وبالتالي إلى تدرجات في التركيز أو الضغط أو درجة الحرارة. تتوافق هذه التدرجات مع توزيعات درجة التفاعل وبالتالي قابلية أكبر أو أقل للتفاعل. تؤثر هذه التدرجات على عواقب اللهب، والتي هي موضوع هذا العمل حول الاحتراق في البيئات التفاعلية في حالة محصورة من أجل تحسين التحكم في جميع المعلمات الفيزيائية وفهم فيزياء الانفجارات، لأن الأعمال التي أجريت حتى الآن تظهر أن عدم تجانس خليط يعرض تدرجًا في التركيز يمكن أن يكون له تأثير كبير على ديناميكية الانفجار ويمكن دراسته بدقة. في الواقع، يظهر وجود آلية لتسريع اللهب مصحوبة بزيادة في الضغط عندما تعبر اللهب التدرجات بالإضافة إلى ذلك، قد تتوافق هذه التدرجات مع توزيعات درجة التفاعل وبالتالي قابلية أكبر أو أقل للتفاعل. يعني هذا أن المناطق التي تحتوي على تركيزات أعلى من المواد الكيميائية المتفجرة أو درجة الحرارة أو الضغط تكون أكثر عرضة للاشتعال كما تؤثر هذه التدرجات على عواقب الانفجار، والتي هي موضوع هذا العمل حول الاحتراق في البيئات التفاعلية في حالة محصورة من أجل تحسين التحكم في جميع المعلمات الفيزيائية وفهم فيزياء الانفجارات. لأن الأعمال التي أجريت حتى الآن تظهر أن عدم تجانس خليط يعرض تدرجًا في التركيز يمكن أن يكون له تأثير كبير على ديناميكية الانفجار ويمكن دراسته بدقة. في الواقع، يظهر وجود آلية لتسريع اللهب مصحوبة بزيادة في الضغط عندما تعبر اللهب التدرجات ويمكن أن ينتشر بشكل أسرع عندما يمر عبر التدرجات في تركيز المواد الكيميائية المتفجرة وتشير هذه الدراسة إلى أن عدم تجانس السحابة الغازية التي تنفجر يمكن أن يكون له تأثير كبير على عواقب الانفجار. من المهم أن تأخذ هذه التأثيرات في الاعتبار عند تقييم مخاطر اللهب.

INTRODUCTION

La combustion est une réaction chimique de deux réactifs qui se déroule dans des zones localisées, appelées flammes. Les modèles de flamme supposée sont fondés sur l'hypothèse que la flamme est une surface mince qui s'étend dans le mélange réactif [1.2.3]. Les modèles utilisent des équations de transport pour les espèces chimiques et l'énergie, et résolvent les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour le fluide [4.5.69]. Ils intègrent également des termes sources pour décrire les conséquences de la réaction chimique. Les modèles de flamme suggérés sont simples et efficaces, mais ils peuvent être limités dans leur capacité à détecter les détails des structures de flamme [6.8.10]. La flamme est caractérisée par l'émergence de variations de température et de pression, ainsi que par des écarts entre les concentrations des produits et des réactifs. La diffusion est l'un des phénomènes physiques complexes fortement couplés, ce qui permet de décrire la combustion par tranche. [7.11.69].

La maîtrise de la conversion d'énergie repose en grande partie sur l'étude des phénomènes d'hétérogénéité dans la combustion. Divers systèmes industriels en dépendent, notamment la production d'énergie thermique (chaudières, fours domestiques et industriels) [11.12], d'électricité (centrales thermiques) ou encore les applications liées aux transports (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs de fusée). Près de 90% des besoins énergétiques à l'échelle mondiale sont satisfaits par des phénomènes de combustion, impliquant de nombreux processus physiques et chimiques à étudier [6.8.13.14]. La combustion de mélanges non homogènes nécessite notamment la détermination du champ de pression, de la vitesse de la flamme et de sa propagation, ces paramètres présentent donc un intérêt critique [1.9.15.16].

Dans ce travail, nous nous intéressons plus particulièrement aux problèmes liés à la distribution du gradient de réactivité dans un milieu réactif et confiné, et aux difficultés liées à la prise en compte des hétérogénéités. En outre, nous nous penchons sur la modélisation et la résolution analytique et numérique de la loi de Fick. Enfin, on a examiné le phénomène de diffusion moléculaire et de combustion par tranche. Ce phénomène est régi par des équations complexes et combinées. De nombreuses études se sont penchées sur la modélisation de la combustion, et les progrès de la CFD (Dynamique des Fluides Computationnelle) proposent de nombreux modèles, dont les trois approches les plus utilisées [10.17.18]:

La compréhension du défi de modéliser les flammes turbulentes de prémélanges est cruciale en prenant en compte la complexité de la combustion turbulente [15.19].

Des recherches supplémentaires sont nécessaires pour améliorer les modèles de combustion et de turbulence, ainsi que les méthodes numériques, afin de mieux capturer les phénomènes clés de la combustion de prémélangée. Néanmoins, la modélisation offre déjà des opportunités intéressantes pour étudier et prédire comment les flammes se comportent dans diverses applications industrielles et environnementales.

RANS: Reynolds-Averaged Navier Stokes;

DNS : Direct Numerical Simulation ; LES

: Large-Eddy Simulation.

Dans cette étude, nous appliquons un modèle basé sur l'approche LES (Large Eddy Simulation). Diverses techniques numériques et semi-empiriques ont été utilisées pour calculer les différents paramètres physiques et chimiques afin de déterminer l'évolution de la température et de la pression pendant la combustion, le taux de production des espèces et la vitesse de flamme produite par une réaction chimique du mélange propane - l'oxygène [5.20.23].

Les simulations sont effectuées à l'aide du logiciel CFD ANSYS. Elles offrent la possibilité d'évaluer la propagation de la flamme, sa vitesse, ainsi que les distributions de pression et de température.

Notre étude s'inscrit dans la recherche de solutions visant à minimiser ou limiter les risques industriels de détonation tout en réduisant les émissions de gaz polluants produits par les transformateurs d'énergie. Cette approche permet d'établir les conditions optimales pour l'utilisation d'un mélange de gaz non polluant dans les machines thermiques en outre ce travail vise à améliorer la compréhension des flammes turbulentes prémélangées, afin de mieux prévenir les risques industriels

L'objectif de cette étude était, d'analyser les mécanismes de développement de propagation des explosions en milieu réactif non homogène en situation confinée, et de dresser un état de l'art et d'acquérir une solide compréhension de la physique des déflagrations (I.e. flammes) afin de mieux gérer tous les paramètres pilotes. L'étude de la propagation des flammes au sein d'un milieu réactif hétérogène implique des difficultés majeures émanant en grande partie d'une connaissance ou d'un contrôle insuffisant de la production du gradient de concentration. En conséquence, il est essentiel d'avoir à la fois des approches théoriques et expérimentales pour mener à bien ces travaux.

Dans un second temps, les équations concernant tous ces phénomènes mentionnés (diffusion, combustion) ont été établies. Ensuite, un outil numérique a été mis au point pour rendre possible

l'interprétation d'expériences expérimentales. Cela a été fondé sur la reprise et l'amélioration des travaux antérieurs réalisés au laboratoire. Actuellement, cet outil permet de simuler la propagation des molécules et la combustion par tranche dans un gradient de concentration. Ce type de solutions nous permet de résoudre de véritables problèmes liés aux explosions réactives. La comparaison des résultats disponibles sera un support très important dans le cadre d'une étude paramétrique et l'exploitation du logiciel en parallèle à ça des essais à l'aide d'un dispositif expérimental (montage de la manipulation ; la connectivité des différentes parties ; dispositif de commande, système d'acquisition) pour les essais expérimentaux. Pour cela, une analyse paramétrique caractérisant l'effet d'accélération de la flamme ainsi que la signature du signal de pression en fonction de gradient de réactivité sera menée, couplée à un dispositif de visualisation de propagation de la flamme.

La combustion est un processus complexe qui implique à la fois des aspects chimiques, physiques, thermodynamiques et hydrodynamiques qui se matérialise par un ensemble de réactions chimiques, générant de la chaleur et propageant la flamme dans le milieu réactionnel. Sa rapidité d'action lui permet d'être utilisée dans de nombreuses applications, notamment dans les secteurs de la sécurité industrielle, de la production d'énergie et du transport.

Elle peut se produire dans des conditions diverses

Pour comprendre et maîtriser ce phénomène exothermique, il est essentiel d'examiner la combustion, qui se produit habituellement avec une émission de chaleur et de lumière [1.18.24.25].

Les objectifs de ce travail de recherche sont de comprendre et de prédire le comportement des flammes turbulentes de prémélanges qui sont caractérisées par des fronts de combustion qui se propagent dans un milieu gazeux. Bien que ces flammes soient complexes et difficiles à modéliser, elles jouent un rôle crucial dans de nombreux domaines, notamment la combustion des moteurs à réaction et des centrales électriques. La méthode de simulation à grandes échelles (LES) a pour but de comprendre et prédire le comportement de ces systèmes complexes [19.20.26.28] En simulant les flammes turbulentes qui apparaissent lors des prémélanges. La compréhension de la phénoménologie de la combustion requiert des connaissances provenant de diverses disciplines..

Objectifs de la recherche.

Les principaux objectifs de ces travaux de recherche sont multiples et sont fixés comme suit :

- L'intérêt principal de la modélisation des flammes turbulentes de prémélanges est de comprendre et de prédire, le comportement de ces systèmes complexes, la formation des polluants et à développer des stratégies de combustion plus propres, est de réduire les émissions de polluants tels que les monoxydes de carbone et les particules fines en optimisant les processus de combustion les caractéristiques de la flamme, et de réduire les émissions polluantes. En mettant en œuvre ces objectifs, nous pouvons mieux appréhender les processus de combustion et progresser dans l'optimisation des systèmes de combustion. Afin d'atteindre ces objectifs, voici quelques objectifs particuliers associés à cette étude :
- Le premier chapitre est réservé à l'état de l'art
- Ce deuxième chapitre de cette thèse vise à réaliser un montage expérimental implique de diffuser deux mélanges gazeux dans deux parties distinctes, séparées par une membrane, et de visualiser comment la flamme se propage.
- Chapitre 3,4. Ils sont consacrés à la modélisation de la diffusion moléculaire et de la combustion par tranches et aux différentes équations associées
- Le chapitre 5 est consacré à l'analyse des résultats obtenus en programmant les phénomènes étudiés, présentés sous forme de graphiques et de tableaux.
- La conclusion générale et les perspectives finalisent par la thèse.

CHAPITRE 1. GENERALITES ET ETAT DE L'ART

1. Généralités et Etat de l'art

1.1. Généralités

Ce domaine d'étude passionnant s'intéresse aux interactions entre les écoulements de fluides et les réactions chimiques, en particulier dans le contexte de la combustion, ce phénomène omniprésent dans notre vie quotidienne. Elle alimente nos moteurs de véhicules, nos centrales électriques et même nos corps. Comprendre les mécanismes sous-jacents à la combustion est nécessaires pour optimiser ces processus et réduire leur impact environnemental[32].

Ces écoulements réactifs produisent des réactions chimiques. Ces réactions peuvent modifier les propriétés du fluide, telles que sa température, sa vitesse et sa composition. L'étude des écoulements réactifs est essentielle pour la conception de moteurs, de brûleurs et d'autres systèmes de combustion efficaces[34.35.75.76]. À partir de cette étude, un modèle de diffusion de deux gaz est utilisé pour l'approche unidimensionnelle.

Ce modèle détaillé a ensuite été utilisée pour étudier les mécanismes réactionnels en phase gazeuse et de l'hétérogénéité des mélanges de gaz. Des simulations pour différentes compositions du gaz, de plus en plus complexes, contenant les composants du mélange propane-oxygène pour lesquels des données expérimentales existent et ont été réalisées afin de sélectionner le mécanisme de la combustion par tranche utilisé par la suite. En commençant par l'étude de gradient de réactivité du mélange C_3H_8/O_2 , la combustion a été étudiée par la suite afin de d'améliorer les mécanismes réactionnels. Enfin, la combustion par tranche d'un mélange hétérogène a été simulée[36.37.75].

Globalement, la combustion est une réaction d'oxydation d'un réactif réducteur appelé combustible (hydrogène et méthane par exemple), par un réactif oxydant qu'on désigne par le terme générale comburant (oxygène par exemple). Ce phénomène complexe implique des interactions entre la dynamique des fluides, la cinétique chimique et la thermodynamique. chimique, et la thermodynamique.

La réaction globale peut s'écrire d'une façon plus générale, pour un hydrocarbure C_nH_m . [3.29]



Dans cette expression, Q est la quantité de chaleur libérée par une mole de combustible brûlé est appelée chaleur de combustion.

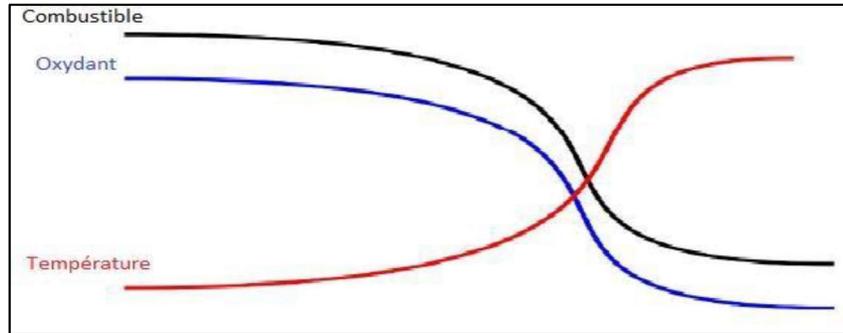


Figure 0.1 Variation de température au cours d'une combustion [3].

1.1.1 Différents types de combustion

Il existe plusieurs types de combustions :

- Combustion complète : air en quantité suffisante pour entretenir la combustion →dégagement de CO_2 (dioxyde de carbone)
- Combustion incomplète : air en quantité insuffisante pour entretenir la combustion →dégagement de CO (monoxyde de carbone)
- Combustion lente : ex. : rouille
- Combustion spontanée : ex. : fermentation
- Combustion très vive ou instantanée : ex. : déflagration ou détonation

Une flamme est un milieu réactionnel dans lequel se déroule une réaction de combustion.

Sa propagation dans l'espace s'accompagne dans la plupart des cas, sauf pour les flammes d'hydrogène, d'une émission lumineuse dans le visible générée lors de la désexcitation de certaines espèces radicalaires carbonées ou halogénées produites lors du processus de combustion [5.39.40.41.69]. La partie lumineuse de la flamme est appelée front de flamme, onde de combustion ou encore zone de combustion. Les propriétés de propagation spatiale de la flamme résultent de l'action conjuguée de processus chimiques (production rapide de chaleur et d'espèces chimiques réactives) Fig, physiques (transport, diffusion), ainsi que de déplacement de matière (diffusion moléculaire) et de chaleur (convection) [23.42.76].

La notion de flamme englobe différents processus et peut être caractérisée à l'aide de différents paramètres qui présentent l'avantage de permettre une classification. Les trois paramètres principaux sont :

- la nature et le nombre de réactifs ;
- le mode d'introduction des réactifs ;
- le régime d'écoulement des gaz dans le milieu réactionnel [5.44.69].

1.1.2 Nature et le nombre de réactifs :

Les réactifs composant le mélange initial introduit dans les chambres de combustion, peuvent être solides, liquides ou gazeux. Deux types de réactifs, le combustible et le comburant, permettent de produire une flamme. La dilution du mélange réactionnel par l'ajout d'une espèce inerte (argon, azote) permet notamment de contrôler la température du milieu réactionnel.

La composition du mélange est également caractérisée par les trois paramètres qui sont, le facteur de richesse « φ », l'excès d'air « E » et la dilution « α ». Le facteur de richesse (richesse ou rapport d'équivalence) φ est égal au rapport de la fraction molaire du combustible sur celle du comburant dans le mélange, divisé par le même rapport dans les conditions stœchiométriques :

$$\varphi = \frac{\left(\frac{X_{\text{combustible}}}{X_{\text{comburant}}}\right)_{\text{mélange}}}{\left(\frac{X_{\text{combustible}}}{X_{\text{comburant}}}\right)_{\text{stocheometrique}}} \quad (1.2)$$

lorsque $\varphi < 1$, la flamme est dite pauvre (défaut en combustible, excès de comburant).

- lorsque $\varphi = 1$, la flamme est dite stœchiométrique.
- lorsque $\varphi > 1$, la flamme est dite riche (défaut en comburant, excès de combustible).

L'excès d'air « E » correspond à l'excès d'oxygène dans le mélange comparé à la stœchiométrie :

$$E = \frac{X_{O_2}}{(X_{O_2})_{\text{stocheometrique}}} - 1 \quad (1.3)$$

Le facteur de dilution « α » représente la fraction de gaz inerte dans le mélange réactionnel $\alpha = 100z_i$ (avec z_i fraction molaire du gaz inerte).

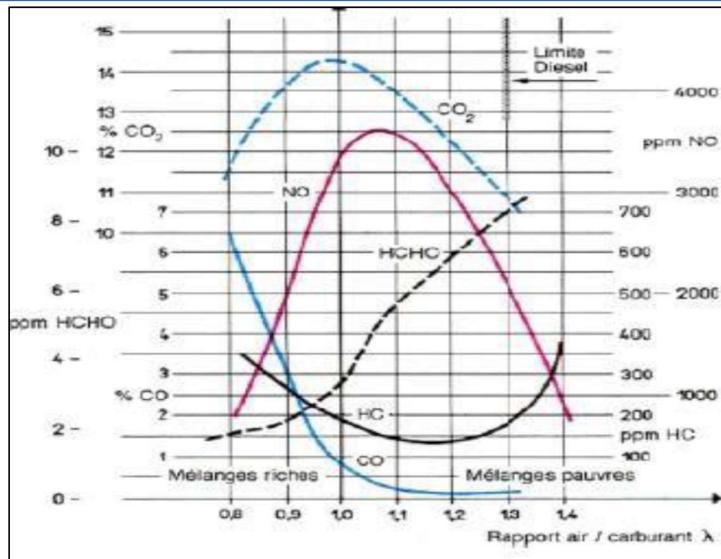


Figure 0.2 Evolution de la concentration en fonction de la richesse [5].

Le mode d'introduction des réactifs :

Les flammes qui s'y propagent peuvent être classées en deux grandes familles

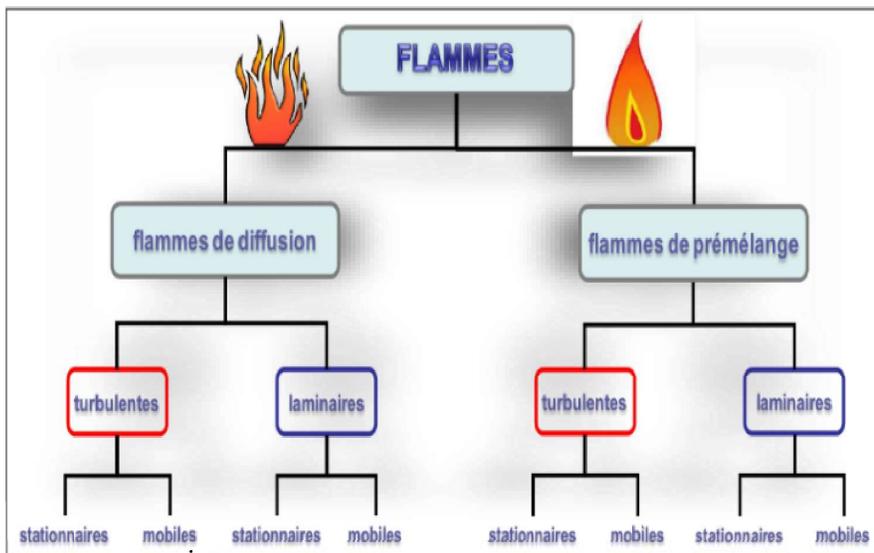


Figure 0.3 Classification des types de flammes.

- ✚ Flamme pré-mélangée où le combustible et le comburant sont intimement mélangés.
- ✚ Flamme non pré-mélangée où le combustible et le comburant sont amenés séparément dans la flamme (flamme de diffusion) Figure (1.3).

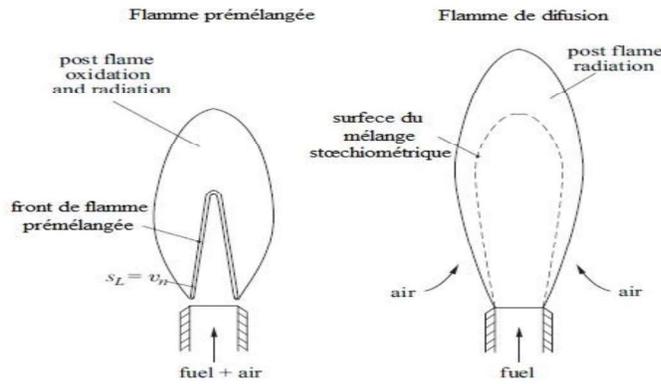


Figure 0.4 Schéma d’une flamme pré-mélangée et non pré-mélangée [35].

Flamme laminaire de pré-mélangée

Dans les flammes pré-mélangées, le combustible et le comburant sont mélangés à l’avance idéalement jusqu’à l’échelle moléculaire, avant de réagir Figure (1.5). Après l’allumage, la flamme se propage en direction des gaz frais avec une vitesse caractéristique qui dépend principalement de la richesse, de la température et de la pression du mélange réactif [27.46.47.48.76].

Cette propagation est issue de la diffusion de chaleur en amont du front de flamme qui préchauffe les réactifs et enclenche les réactions chimiques.

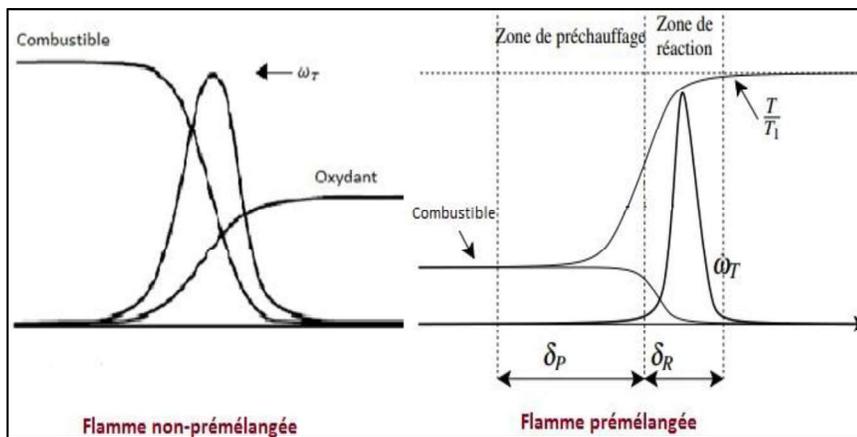


Figure 0.5 Structure des flammes pré-mélangée et de diffusion [5].

Flamme laminaire non pré-mélangée

Les flammes ne se mélangent pas avant la propagation, mais le combustible et l'oxyde doivent d'abord être séparés avant de pouvoir se rapprocher pour réagir. Figure (1.5), ensuite les réactifs sont insérés avec exactitude dans la zone de réaction, de chaque côté de la flamme.

Ils sont ensuite principalement entraînés dans la zone de réaction en diffusant des molécules qui acheminent le combustible vers l'oxydant, et vice versa. [3.49.].

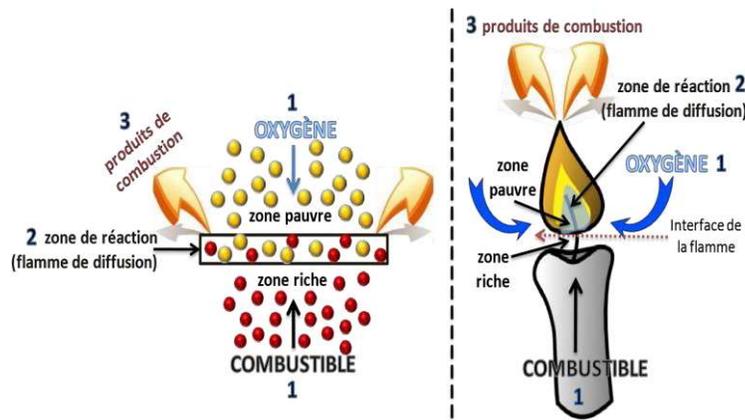


Figure 0.6 Schéma d'une flamme de diffusion.

La couleur bleue de la flamme de diffusion ressemble à celle d'une flamme de prémélange, car elle indique l'endroit où l'oxygène pénètre pour se mélanger avec le combustible cela rend le mélange plus homogène.

Les principales caractéristiques d'une flamme de diffusion :

- mélange du comburant/combustible contrôlé naturellement par diffusion sur intervalle de températures moyennes allant d'environ 900 °C à 1500 °C
- vitesse de propagation du front de flamme moyenne pour les liquides et plusieurs m/s pour les gaz, la température et la vitesse de combustion diminuent en fonction de la hauteur. La flamme commence par être laminaire et devient rapidement irrégulière, provoquant un écoulement turbulent et en raison de l'augmentation de la hauteur et du diamètre de combustion, il y a une grande incohérence des propriétés physicochimiques dans la flamme (température, pression, composition, etc.) comme le montre la figure (1.7). Lorsque la combustion est incomplète ou non stœchiométrique, la fumée et les gaz non brûlés sont produits de manière significative, avec un front de flamme irrégulier qui sépare le milieu combustible du milieu oxydant.

Tableau 0.1 Avantages et des inconvénients des types de flammes [5.30].

Type de flamme	Avantages	Inconvénients
Pré-mélangée	Peu polluant	Instabilité de combustion, Stockage du mélange
Non pré-mélangée	Stabilité de la flamme, stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Production d'oxydes d'Azote

Les écoulements laminaires se produisent lorsque le nombre de Reynolds est réduit, tandis que les écoulements turbulents surviennent lorsque le nombre de Reynolds est augmenté. La turbulence survient lorsque l'écoulement laminaire est instable en raison des petites perturbations expérimentales possibles, tandis que l'état turbulent correspond à la situation non stationnaire vers laquelle tend l'écoulement instable.

Pour faire la distinction, il suffit de calculer le nombre de Reynolds $Re = \rho U d / \mu$ en utilisant une vitesse et une dimension caractéristique du problème examiné. La transition d'un régime laminaire à un régime turbulent se produit progressivement sur une plage critique de nombre de Reynolds, dont les valeurs varient en fonction de chaque problème, lorsqu'un nombre de Reynolds est inférieur à 2200, on qualifie l'écoulement de laminaire, au-delà de 3000, le régime devient turbulent. Pour des valeurs comprises entre 2200 et 3000, l'écoulement est considéré comme transitoire [7.55.57].

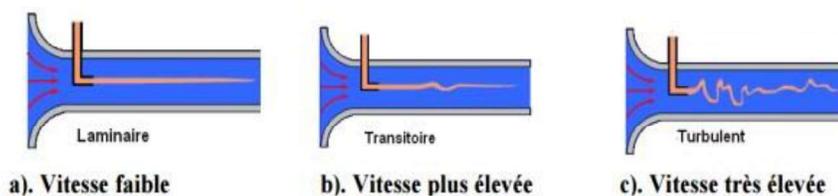


Figure 0.7 Différents régime d'écoulement [9].

1.1.3 Modes de propagation

Dans la zone de réaction exothermique, qui est le lieu de la réaction explosive, ou simplement dont l'épaisseur est réduite à une fraction de millimètre, les réactifs se métamorphosent en produits brûlés, et l'énergie chimique se convertit en chaleur. La propagation de la flamme est différente de celle du gaz, mais elle se produit lorsque des couches de gaz non brûlés entrent en réaction chimique

les unes après les autres. Deux modes de propagation peuvent être alors définis selon le niveau de la vitesse de la flamme : la détonation et la déflagration. Au cours de la déflagration le front de la flamme se déplace à une vitesse subsonique c'est-à-dire inférieure à la vitesse du son pour laquelle résulte à la fois la diffusion de la chaleur ainsi que la diffusion des espèces actives. La déflagration donc associe une zone

de transformation chimique (combustion) d'épaisseur non négligeable et une onde à des phénomènes de dynamique des fluides (onde de pression) ou les écarts de pression à un instant donné restent faibles entre les divers points de gaz. Cette onde de pression, propage en amont de celle-ci dans tout le domaine et possède une vitesse sonique tandis que le front de combustion se propage à une vitesse subsonique [37.58.59.69].

Par contre, la vitesse de détonation est supersonique donc supérieur à la vitesse du son d'où l'onde de choc et le front de flamme sont confondus ce qui a pour conséquence une augmentation considérable de la pression (suit après d'une dépression), un déplacement de volume d'air très important et un bruit très élevé. Les produits d'explosion sont lancés dans le même sens que l'onde et peuvent atteindre des températures avoisinant 4000 °C et des pressions 50 fois supérieures à la pression initiale [6.38.70.71].

On note qu'une déflagration peut se transformer en détonation si le front de flamme s'accélère jusqu'il rattrape l'onde de choc, Figure(1.7).

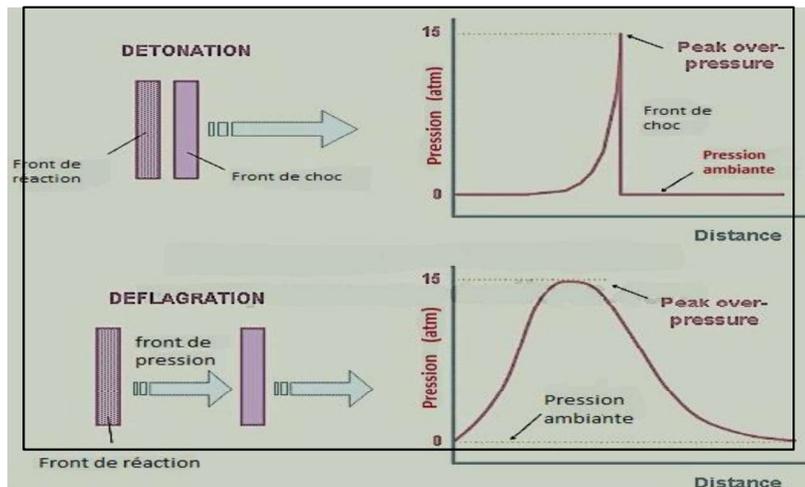


Figure 0.8 Comparaison de la dynamique des gaz de combustion [6].

La Figure(1.8) illustre que lors d'une détonation, le gaz est comprimé par l'onde de choc, avec une célérité élevée (plus de 1 km/s) et la réaction s'achève rapidement dans une zone mince derrière le choc. Néanmoins, il est envisageable que les perturbations derrière le front de réaction se

propagent et produisent du gaz non brûlé avant que le front de réaction n'arrive dans une déflagration. Les vitesses d'explosion sont faibles ou modérées (0.1 cm/s à 100 m/s) en opposition à celle de l'onde [40.72.72.75.91].

Les zones de la flamme : Une flamme monodimensionnelle stabilisée se caractérise par trois zones spatiales distinctes.

- une zone de gaz frais dans laquelle les réactions de combustion sont initiées. Elle correspond à la zone comprise entre la surface du brûleur et le début de la zone lumineuse de la flamme. Cette zone a une épaisseur comprise entre 2 et 10 mm dans nos conditions expérimentales, selon la flamme étudiée. Les réactions s'y amorcent par la diffusion de la chaleur et des radicaux en provenance de la zone réactionnelle.
- une zone réactionnelle (ou front de flamme) correspondant à la partie lumineuse visible de la flamme. L'épaisseur du front de flamme est d'environ 4-6 mm dans nos conditions expérimentales où les flammes sont stabilisées à 60 Torr [76.82.86.91]. Le front d'une flamme d'hydrogène (non ensemencée en iode) n'est pas visible du fait de l'absence de radicaux halogénés ou carbonés.
- et une zone de gaz brûlés qui est la région située en aval du front de flamme.

Dans nos conditions, on peut considérer que les gaz brûlés sont localisés entre 6 et 16 mm audessus la flamme.

• Courbes d'Hugoniot-Rankine

La variation des grandeurs dans une réaction chimique, les grandeurs des réactifs et celles des produits peuvent être connues grâce aux valeurs des enthalpies avant la combustion et après.

La courbe d'Hugoniot-Rankine permet d'illustrer la variation de pression en fonction de masse volumique [1.77.78.82].

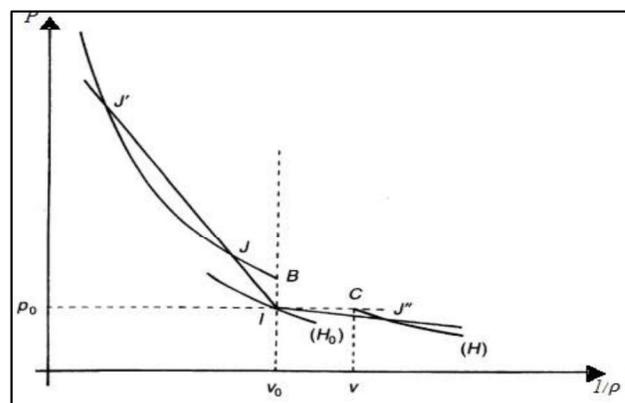


Figure 0.9 Courbe d'Hugoniot-Rankine pression/volume massique [5].

La représentation graphique de l'évolution de l'enthalpie du système en fonction de l'avancement de la réaction montre une décroissance nette, traduisant la libération d'énergie sous forme de chaleur. Le point initial (H_0) correspond à l'état des réactifs, tandis que le point final (H) correspond à l'état des produits, à une température et une pression plus élevées.

Du point I de la première on peut par combustion atteindre un point J, J'ou J" de la seconde.

- Soit au-dessus du point B, donc avec $(p - p_0)$ positif et $(1/\rho - 1/\rho_0)$ négatif, c'est le cas de la détonation.
- Soit au-dessus du point C, donc avec $(p - p_0)$ négatif et $(1/\rho - 1/\rho_0)$ positif, c'est le cas de la déflagration.

Comme on le voit dans la Figure (1.9), la droite de Rayleigh, possède une pente changée de signe $(\rho_0 V_0)^2$, plus faible pour la déflagration que pour la détonation. De même pour ρ_0 et V_0 .

1.2 Les Principaux Aspects de Simulation

Les principaux aspects de la modélisation des flammes turbulentes prémélangées comprennent :

Les modèles de combustion adaptés à la (LES) doivent prendre en compte les phénomènes de mélange turbulent, de propagation de la flamme, de cinétique chimique et d'interaction avec les échelles de turbulence résolues, les modèles les plus couramment utilisés incluent les modèles de flamme épaissie, les modèles de densité de flamme (FDM) [48.82].

Des modèles classiques tels que le modèle de Smagorinsky ou le modèle de filtrage dynamique sont souvent utilisés [5.49.76.82].

La simulation nécessite des schémas numériques adaptés pour résoudre les équations de Navier Stokes compressibles, les équations de conservation de l'espèce chimique et les équations de transport d'énergie pour le fluide. Ils incorporent également des termes source pour représenter les effets de la réaction chimique. Des méthodes numériques telles que les schémas d'ordre élevé, les méthodes de décentrage, les méthodes de WENO (Weighted Essentially NonOscillatory), les schémas de différences finies ou les méthodes de Galerkin sont souvent utilisées [50].

Les conditions aux limites pour les simulations LES des flammes doivent tenir compte des conditions réalistes d'injection de carburant et d'oxydant, ainsi que des conditions de paroi [51].

La modélisation des flammes par la simulation nécessite une validation expérimentale pour évaluer la précision des résultats simulés. Des données expérimentales, telles que des mesures de profils de

vitesse, de concentrations et de température, sont nécessaires pour comparer avec les résultats de la simulation [52.53].

Il convient de noter que la modélisation des flammes turbulentes prémélangées reste un défi en raison de la complexité de la combustion turbulente. Des recherches supplémentaires sont nécessaires pour améliorer les modèles de combustion et de turbulence, ainsi que les méthodes numériques, afin de mieux capturer les phénomènes clés de la combustion turbulente prémélangée [54]. Cependant, la simulation offre déjà des perspectives intéressantes pour étudier et prédire le comportement des flammes dans diverses applications industrielles et environnementales.

La modélisation des flammes turbulentes prémélangées par la méthode de simulation est un domaine de recherche actif dans le domaine de la combustion. L'approche numérique qui permet de résoudre directement les équations fondamentales de la mécanique des fluides pour les grandes échelles spatiales, tout en modélisant les effets de la combustion par tranche [55]. Dans le contexte des écoulements réactifs, la simulation vise à capturer les structures de flamme qui jouent un rôle essentiel dans la propagation de la flamme et la formation des espèces réactives, cela permet une modélisation plus précise des phénomènes turbulents et chimiques qui se produisent dans ces zones de réaction [56].

. Parmi les méthodes les plus couramment utilisées, on trouve les modèles de combustion de type flamme présumée, les modèles de chimie tabulée et les modèles de densité de flamme [57.58.76].

Les modèles de chimie tabulée utilisent des tables de cinétique chimique précalculées pour représenter les réactions chimiques qui se produisent dans la flamme. Ces modèles permettent une représentation plus précise des phénomènes chimiques, mais ils peuvent être coûteux en termes de temps de calcul en raison de la nécessité de résoudre des équations supplémentaires pour les espèces chimiques.

Les modèles de densité sont basés sur l'idée de représenter la propagation de la flamme par une densité de flamme scalaire. Ces modèles utilisent des équations de transport pour la densité de flamme et résolvent les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour le fluide. Ils sont particulièrement adaptés pour capturer les structures de flamme [59.60.76.91].

En plus de ces approches de modélisation des flammes prémélangées peut également être améliorée par l'utilisation de techniques avancées telles que l'assimilation de données expérimentales, la résolution adaptative pour la résolution est nécessaire pour l'utilisation d'un schémas numériques hautement précis[75], ce qui permet de dire que la modélisation de la combustion de prémélanges par la méthode de simulation est un domaine de recherche en évolution

qui vise à améliorer notre compréhension des phénomènes de combustion. Les différentes approches de modélisation permettent de représenter les structures de flamme et les réactions chimiques de manière plus précise, mais des défis subsistent en termes de coût de calcul et de représentation des termes de couplage complexes entre la flamme et la cinétique chimique [16.62.82].

La modélisation de la combustion par tranche par la méthode de simulation constitue un domaine de recherche essentiel dans l'étude des processus de combustion qui donne la possibilité de comprendre et de prédire le comportement de ces flammes turbulentes, ce qui ouvre la voie à l'optimisation des systèmes de combustion, à l'amélioration de l'efficacité énergétique et à la réduction des émissions polluantes[64.90.91].

1.3 Etat de l'art :

L'étude numérique des écoulements turbulents réactifs est un domaine de recherche actif avec des applications dans un large éventail de domaines, notamment la combustion, la propulsion, l'environnement et la chimie industrielle. Les écoulements turbulents réactifs sont caractérisés par des interactions complexes entre la turbulence, la chimie et le transport, La compréhension et la prédiction du comportement de ces écoulements complexes sont essentiels pour optimiser les performances des systèmes thermiques [75.79.91].

Diverses approches de simulation numérique ont été développées pour étudier les écoulements turbulents réactifs. Les plus couramment utilisées sont :

- Approches basées sur les équations de Navier-Stokes (RANS) :

Ces approches résolvent les équations moyennes des écoulements turbulents, en utilisant des modèles de turbulence pour représenter les fluctuations stochastiques. Les modèles RANS sont relativement peu coûteux en termes de calcul et sont couramment utilisés pour des simulations à grande échelle. Cependant, ils peuvent ne pas capturer correctement les structures fines de la turbulence et les interactions entre la turbulence et la chimie. . [32.69.80.81].

- Approches par simulation des grandes échelles (LES): Ces approches résolvent directement les grandes échelles de la turbulence, tout en modélisant les petites échelles. [31.76.82.83.91].
- Ces approches peuvent fournir des résultats plus précis que les simulations RANS, mais elles sont beaucoup plus coûteuses en termes de calcul.
- Approches combinées RANS/LES (Hybride RANS/LES) :

Ces approches combinent les avantages des approches RANS et LES en simulant les grandes échelles avec (LES) et les petites échelles avec RANS.

La simulation numérique des écoulements turbulents réactifs en régime de prémélange est particulièrement importante pour la modélisation de la combustion des moteurs à combustion interne et des turbines à gaz. [31.75.84.85.91].

Dans les écoulements de prémélange, le combustible et le comburant sont mélangés avant que la réaction ne se produise. La vitesse de réaction est généralement limitée par la vitesse de mélange turbulent.

Plusieurs modèles de combustion ont été développés pour simuler les écoulements turbulents réactifs en régime de prémélange. Les modèles les plus couramment utilisés sont :

- Modèle de combustion infiniment rapide : Ce modèle suppose que la réaction chimique se produit instantanément dès que les réactifs sont mélangés dans les proportions stœchiométriques.
- Modèle d'équilibre chimique : Ce modèle suppose que la réaction chimique est en équilibre thermodynamique local.
- Modèle de flamme de surface : Ce modèle suppose que la réaction chimique se produit dans une mince zone de flamme à l'interface entre le combustible et le comburant.
- Modèle de combustion RANS/LES : Ce modèle combine un modèle de combustion RANS avec un modèle LES pour simuler la combustion dans les écoulements turbulents. [86.87.91]. La simulation est une méthode numérique qui permet de représenter les grandes structures turbulentes d'un écoulement tout en modélisant les effets de la combustion de manière précise [3.75.76.88.91].

Dans le contexte des flammes turbulentes prémélangées, la simulation vise à capturer les caractéristiques clés de la combustion, telles que l'interaction entre la turbulence et la propagation de la flamme, sans résoudre toutes les échelles de turbulence. Cela permet de réduire considérablement les coûts de calcul par rapport à d'autres méthodes de simulation directe de combustion [45.82.89.91].

CHAPITRE 2. MONTAGE EXPERIMENTAL

2 Montage expérimental

2.1 Introduction

On suppose généralement, parfois implicitement, que le nuage gazeux (formé à la suite d'un rejet accidentel, par exemple) qui explose est uniforme et homogène. Mais, en pratique, le nuage résulte souvent d'un rejet accidentel d'une substance chimique dans l'air conduisant à un mélange gazeux non uniforme et donc à des gradients de concentration, de pression, ou de température. A ces gradients correspondent des répartitions du degré de réactivité et par suite une aptitude plus ou moins grande à réagir.

Ces gradients ont une influence sur les conséquences de l'explosion dont le but est d'étudier les spécificités du développement et de proposer une représentation physique de ces phénomènes en analysant le signal de pression, l'évolution de la zone réactive on faisant varier différents paramètres richesse et temps de diffusion du mélange gazeux initial à partir d'une approche expérimentale à l'échelle réelle. Et nous comparant nos résultats à celles relevées à travers l'étude bibliographique notamment concernant pression, vitesse, position, et surface de la flamme

Il serait alors intéressant de développer cette étude dans deux voies complémentaires.

D'une part pratique :

En réalisant une visualisation rapide pour une description intuitive du processus de libération d'énergie, nous pourrions mieux appréhender l'expérience subjective de ce phénomène..

D'autre part théorique : en corrélant les résultats expérimentaux avec une simulation numérique de l'évolution des concentrations dans le domaine spatio-temporel.

L'objectif de la modélisation est de reproduire les résultats expérimentaux à partir d'un mécanisme de diffusion moléculaire et de la combustion par tranche.

La caractérisation de l'explosion des nuages gazeux nécessite de donner une définition du terme explosion. Celle-ci peut varier selon les personnes : pour l'industriel, la simple réaction chimique du combustible (avec l'air par exemple) suffit de définir l'explosion, tandis que le scientifique distingue deux modes de réaction :

« Libération soudaine d'énergie plus ou moins confiné, plus ou moins maîtrisée, avec ou sans conséquences externe. L'explosion peut donner lieu à une onde de pression (onde de souffle), à une boule de feu. Dans le cas de l'explosion chimique, le processus de libération d'énergie peut-être une déflagration ou une détonation. »

Afin de caractériser les différences de vitesse de propagation et d'ondes de pression entre ces deux modes de combustion, un dispositif expérimental dédié sera mis en place. Cet outil permettra d'étudier en détail les mécanismes de diffusion et de propagation de la flamme au sein du mélange.

Le montage spécialement conçu pour cette étude permet non seulement d'analyser la déflagration mais aussi d'assurer un contrôle rigoureux des paramètres expérimentaux pour garantir la sécurité.

2.2 Description générale :

La détermination expérimentale de la combustion est un domaine scientifique vaste et passionnant qui s'appuie sur diverses techniques pour améliorer notre compréhension de ce phénomène fondamental.

Les connaissances acquises grâce à ces recherches contribuent au développement de systèmes de combustion plus efficaces, propres et durables.

La détermination expérimentale des caractéristiques d'une combustion implique l'utilisation de diverses techniques et équipements pour mesurer, analyser et comprendre les phénomènes en jeu d'où l'installation expérimentale proposée pour les différentes expériences est adaptable à toutes sortes de conditions expérimentales. Elle est fixée sur une base maintenue par une structure, qui supporte également la colonne du module du tube transparent droit, objet des études expérimentales. Un cadre, assemblé à partir de poutres en acier de section 5 cm² soudées ensemble, supporte le tube et s'élève jusqu'à une hauteur appropriée. Il maintient le tube vertical à une hauteur raisonnable du sol, comme présenté sur la Figure (2.1).

Les différentes opérations incluent le contrôle, l'enregistrement et la visualisation de la flamme à l'aide des circuits et modules proposés et mis en œuvre, permettant l'obtention et l'exploitation des résultats. Les phases intermédiaires sans l'initiation de l'opération expérimentale dans différentes configurations et l'enregistrement des résultats après chaque essai des différentes étapes de l'expérience.

Les composants de l'installation expérimentale, tant pour sa conception que pour son fonctionnement et ses spécifications, comprennent un système de refroidissement et auxiliaires, ainsi que des éléments de circuit et d'assemblage. De plus, ces unités sont connectées et équipées de capteurs et d'un oscilloscope numérique. Ceux-ci permettent de réaliser les essais sans risque avec des contrôles à l'aide des commandes numériques pour la visualisation des flammes, objets des expériences traitées à l'entrée par l'exploitation de l'installation automatiques et pendant l'exécution de toutes les étapes.

2.2.1 Présentation du tube

Le dispositif expérimental permet de :

- créer un nuage gazeux dont les caractéristiques initiales sont connues :
- d'apporter une quantité d'énergie électrique d'amorçage maîtrisée,
- de quantifier les caractéristiques de l'onde de pression consécutive à l'explosion ;
- d'assurer la sécurité au cours des expérimentations II

se compose d'un :

Bâti: Le bâti, une charpente métallique composée de poutres d'acier soudées entre elles, assure le maintien vertical du tube à une hauteur adaptée aux manipulations expérimentales (tabouret 50*50*50 recevant le poids, tube d'une potence 210*15*5 permettant son maintien vertical.

Figure(2.1)



Figure 2.1 Photo de l'installation expérimentale.

Le tube est composé de deux tronçons (3 plaques plexiglas ,1plaque d'aluminium de 2cm d'épaisseur) de section carrée de(3 cm *3 cm, Figure (2.2.a), de 50 cm de longueur séparé par

une vanne à clapet (12 cm *13 cm *2 cm) actionnées par vérin électrique Figure (2.2.b), permet d'alterner entre un état d'isolation totale des tronçons et un état de communication libre, après purge des systèmes

Après la production d'une étincelle, la flamme, objet de notre évaluation, se propage dans un tube d'un mètre de long en présence de mélanges hétérogènes gaz propane-oxygène. Ces mélanges sont générés par diffusion moléculaire grâce à une valve à clapet. Cette valve permet une communication complète entre les sections sans aucun effet de blocage en position ouverte Figure (2.2)

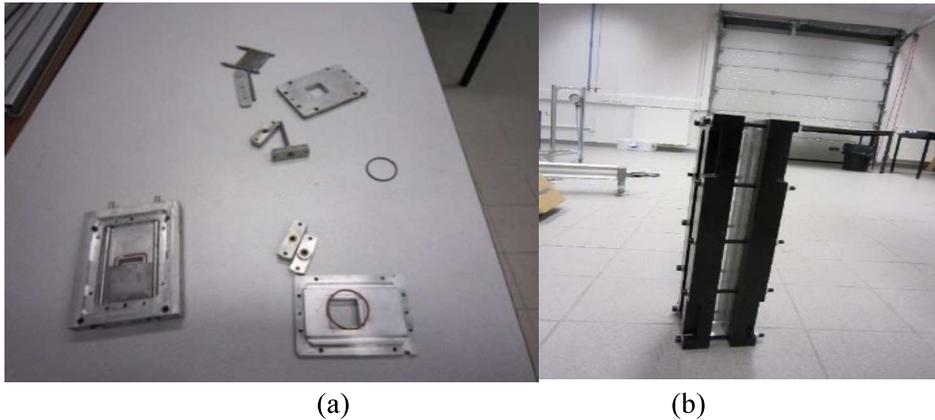


Figure 2.2 Photo vérin -tronçon

Avant la réalisation de l'expérience, il est nécessaire d'effectuer un test d'étanchéité à l'aide d'air comprimé fourni par un moteur-pompe Figure(2.3). Le système est ensuite vidé dans la chambre de l'installation expérimentale, la valve séparant les deux sections étant ouverte. Ceci permet de s'assurer qu'aucune fuite ne subsiste. Une fois l'installation vidée, elle est prête pour une nouvelle expérience : les deux sections sont remplies séparément avec des gaz différents, chacune jusqu'à une pression d'un bar, puis la valve est fermée pour isoler chaque section des autres.

En plus des deux arrivées alimentant les tronçons en mélange gazeux, un circuit séparé, équipé d'une pompe à vide, assure l'évacuation des gaz brûlés



Figure 2.3 Vue d'ensemble de dispositif de vidange.

2.2.2 L'amorçage :

Le système d'amorçage de combustion est un dispositif qui fournit l'énergie nécessaire pour enflammer un mélange combustible et comburant ou pour démarrer une réaction de combustion. Il est essentiel pour le bon fonctionnement de nombreux systèmes de combustion. Ces systèmes sont essentiels pour le bon fonctionnement de nombreux systèmes de combustion. Pour assurer un démarrage rapide et fiable de la combustion, garantissant ainsi sécurité, efficacité et performances, deux systèmes d'amorçage sont principalement utilisés :

- **Système à énergie variable:** Utilisant un fil explosif, ce système permet d'ajuster la quantité d'énergie d'amorçage en fonction des besoins.
- **Système à énergie fixe:** Basé sur une étincelle, ce système fournit une quantité d'énergie d'amorçage prédéfinie."

Dans notre cas l'amorçage de l'explosion obtenue par une étincelle électrique avec une quantité d'énergie électrique nominale de (100 mJ) produite par une bougie de voiture vissée dans la bride inférieure du tube et reliée à un éclateur Figure (2.4), ce dispositif défini comme amorçage faible.

2.2.3 Mesures de l'onde de pression

La mesure de pression est importante pour la combustion. Elle peut être utilisée pour suivre l'évolution de la combustion, notamment la vitesse de combustion, la turbulence et la stabilité elle est mesurée à l'aide de sondes de pression, qui sont généralement des tubes fins et rigides

qui sont insérés dans la zone de combustion. Les sondes de pression peuvent être connectées à des capteurs électroniques qui enregistrent les variations de pression.

Les signaux de pression peuvent être utilisés pour caractériser la combustion. La pression peut être mesurée à différents points de la zone de chambre de combustion,

La caractérisation de l'onde de pression réalisée à l'aide d'une chaîne de mesure constituée de deux capteurs de pression sont des capteurs piezorésistifs (Kstler 4045A100, temps de réponse de $1\mu s$; taille M14*1.25) leurs gamme de mesure est de 0-100 bars, placés selon une même direction vertical en deux abscisses (X1, X2) comptés du lien d'amorçage.

Un capteur est disposé par tronçon, permet de quantifier et qualifier l'onde de pression consécutive à la combustion et de mesure du signal de pression lors des essais, ces capteurs de pression sont des dispositifs qui mesurent des paramètres importants, tels que la température, la pression d'un système de combustion. Ces capteurs sont généralement situés dans des zones très chaudes, ce qui nécessite un système de refroidissement pour les protéger de la surchauffe.

. Les systèmes de refroidissement des capteurs de chambre de combustion utilisent généralement un fluide de refroidissement, tel que l'eau ou l'huile, pour transporter la chaleur loin du capteur. Le fluide de refroidissement est généralement pompé à travers le capteur, où il absorbe la chaleur. Le fluide de refroidissement est ensuite refroidi, généralement dans un radiateur, avant d'être renvoyé au capteur Figure(2.5). Le choix de la méthode de refroidissement doit être fait en fonction des spécificités de l'application et des contraintes du système. Un refroidissement adéquat permet d'améliorer la précision, la stabilité et la durée de vie des capteurs. Les mélanges étudiés diffusent principalement de manière gravitationnelle, avec une densité variable ;

Ascendante pour le gaz léger (densité <1),

Descendante pour le gaz lourd (densité >1)

Ces mélanges sont préparés dans une bouteille de 2 litres, préalablement rendu inerte dont la pureté supérieur 99.99% en mesurant les pressions partielles par un manomètre électrique avec une précision donnée, la connaissance des paramètres initiaux géométrie position énergie d'inflammation, répartition de concentration en combustible est en effet déterminante pour le régime de propagation de la zone réactive au sein du nuage, deux types d'effets sont associier au dernier de ces processus.

Le premier effet : thermique lié à la production d'une quantité importante de gaz frais portés à une température d'inflammation. Le second effet est mécanique, provoqué par la variation de

volume subie à travers la zone réactivée par l'écoulement des gaz frais consommés. En outre, l'accélération d'une déflagration vers une détonation est un phénomène complexe qui dépend de nombreux facteurs. La compréhension des mécanismes d'accélération et l'évaluation de la vitesse critique sont des éléments clés pour assurer la sécurité des procédés industriels et pour développer de nouvelles technologies de combustion.

Tous ces éléments seront utilisés pour préciser dans quelle situation le risque de transition entre régime est présent, de plus, cette transition doit faire l'objet d'une analyse de sûreté.

2.3 Processus expérimental

Le montage expérimental testé est un tube vertical fermé de 1 m de long et de diamètre 0,03 m, favorisant l'apparition des instabilités de flamme. Une paroi amovible (« guillotine ») sépare le tube en parties égales Figure (2. 1), la composition des gaz étant différente de part et d'autre. L'ouverture de la guillotine permet le mélange des gaz par diffusion.

Il a été conçu pour propager une flamme au travers d'un prémélange gazeux contenant un gradient de concentration. Outre ces dimensions (longueur =1 m, largeur des côtés = 0,03 m), la particularité de ce dispositif est de posséder trois faces transparentes et de résister aux hautes pressions (environ 150 bars). Figure (2.7)

Les premiers essais ont été réalisés sur la base d'un mélange de gaz. Afin de caractériser l'interaction entre une flamme et les conditions aérodynamiques.

La configuration expérimentale est favorable pour l'apparition d'instabilités de flamme.



Figure 2.4 Parois de tronçon

Utilisant les principes fondamentaux de la conservation, cette configuration permet une bonne analyse du comportement de la flamme par un recoupement entre la trajectoire de la flamme et

du signal de pression. Plus précisément, le set-up était une chambre transparente qui était résistant aux explosions à haute pression (~ 150 bar).



Figure 2.5 Parois de tronçon

Le tube était composé de deux parties (tronçons) égales, permettant la création de gradients de concentration. Figure (2.1). Ce squelette fourni toute l'assistance mécanique ; mastic silicone a été appliquée comme nécessaires pour assurer les raccords de différents éléments serrés. À l'intérieur de cette structure, les éléments nécessaires aux différentes expériences sont disposés et fixés (moteur de pompe, bougie d'allumage).

L'étude de ce genre de phénomènes, combustion, est évidemment importante dans le cas d'un mélange en milieu confiné ou en milieux naturels. Tels qu'ils se retrouvent dans les applications industrielles, les phénomènes de la combustion relèvent en règle générale de plusieurs disciplines scientifiques différentes parmi lesquelles viennent en ordre principale la chimie, la thermodynamique et l'aérodynamique des fluides.



Figure 2.6 Dispositif expérimental.

C'est l'existence de cette connexion interdisciplinaire qui nécessite l'emploi des méthodes spéciales dans l'étude fondamentale de la combustion et qui donne à cette étude son caractère physico-chimique bien particulier.

Visualisation de Flamme:

La visualisation de flamme est une technique qui permet d'étudier divers aspects de la combustion, tels que la formation de la flamme, la propagation de la flamme et la stabilité de la flamme. Elle peut être utilisée pour comprendre les mécanismes de la combustion et pour identifier les zones de combustion inefficaces. La visualisation de flamme peut être réalisée à l'aide de diverses techniques, notamment :

- L'imagerie optique : Cette technique utilise des caméras pour capturer des images de la flamme.
- La spectroscopie : Cette technique utilise la lumière pour analyser la composition chimique de la flamme.
- La thermographie : Cette technique utilise la chaleur pour visualiser la structure thermique de la flamme.
- L'imagerie optique : L'imagerie optique utilise la lumière pour visualiser la flamme.

Le fonctionnement repose sur l'amélioration des caractéristiques techniques, y compris le montage expérimental, pour permettre la réalisation d'une large variété d'expériences.

Ces expériences sont caractérisées par la visualisation de la flamme d'une séquence en mouvement et à l'arrêt, dont le contrôle est assuré par des capteurs et des photodiodes pour la mesure de vitesse de flamme connectés à des oscilloscopes numériques. Ceci est obtenu après un choix optimal de toutes les caractéristiques Figure (2.6).

2.3.1 Visualisation

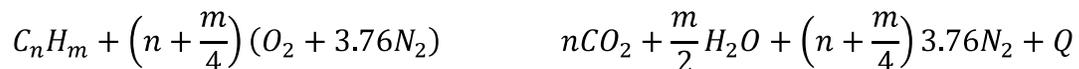
Le dispositif de visualisation est composé de deux amplificateurs de charge (Kistler) et une série d'oscilloscopes numériques de type Tektronix à phosphore dont la fréquence d'acquisition est de 10000 Hz Figure (2.7), l'enregistrement est déclenché simultanément avec l'amorçage grâce à l'utilisation d'une ligne de synchronisation et d'une interface d'acquisition permet d'obtenir des mesures précises et synchronisées, ce qui est essentiel pour l'étude de nombreux phénomènes physiques.



Figure 2.7 Dispositif de visualisation

Les résultats des expériences élaborées sont obtenus à l'aide d'un oscilloscope numérique, de photodiodes Figure (2.7) placées le long de la section gauche de l'installation, et de deux capteurs de pression placés au milieu de chaque section. Notez que les différents modules et éléments sont refroidis par un équipement de refroidissement.

Afin de situer les différents phénomènes de la combustion dans leur contexte physico-chimique, il nous paraît utile de commencer par une description générale de cette réalité physique qu'il est convenu d'appeler l'écoulement réactif exothermique de combustion.



Les équations thermodynamiques introduites nous permettent de modéliser l'interaction entre la mécanique des fluides et la combustion ainsi que les réactions chimiques entre les différents composants du mélange gazeux. Les propriétés de la combustion résultent de l'action combinée de processus chimiques (production rapide de chaleur et d'espèces chimiques réactives), physiques (transport, diffusion), matériels et de déplacement de chaleur [4].

Ces propriétés peuvent être caractérisées par différents paramètres : la nature et le nombre de réactifs, le mode d'introduction des réactifs et le régime d'écoulement du gaz dans le milieu réactionnel [2.3]. La thermodynamique s'implique à un ensemble matériel « système ». Le système n'est défini que si l'on en précise les frontières, et la nature des échanges qu'ils peuvent entretenir avec le milieu l'extérieure. Il sera dit fermé ou ouvert selon la possibilité des échanges de matières [7]. Un système étant défini, on pourra, en principe décrire son état, en déterminant

ses propriétés « grandeurs d'état », entendant par cela l'ensemble des observables : température, pression, volume, quantité de matière, composition par exemple.

Si nous considérons un système occupant le volume V à la température T constitué de n composants chimiques comportant chacun « N_i » nombre de moles, il existe à l'équilibre thermique une variable extensive notée « E » appelé énergie :

$$E(T, V, N_1, \dots, N_n) = E(T, V, N) + E_0$$

E_t : une grandeur extensive

S : appelée entropie :

$$S(T, V, N_1, \dots, N_n) = S(T, V, N) + S_0$$

Ces deux grandeurs sont spécifiées à partir de la donnée de la température, du volume et du nombre de moles de chaque constituant et définies à une constante additive près.

2.3.2 Le premier principe

Le premier principe repose sur l'attribution à tout système matériel fermé d'une propriété extensive, l'énergie et sur l'établissement d'un bilan exact, d'une part, et sur les variations de cette propriété au cours d'une transformation, d'autre part.

$$\Delta E = \Delta(E_p + E_c + U) = W + Q \quad (2.6)$$

E_p : L'énergie potentielle dans le champ pesanteur,

E_c : L'énergie cinétique de l'ensemble du système,

U : L'énergie interne,

W : Le travail fournit au système.

Pour une petite variation l'équation devient :

$$dE = dW + dQ \quad (2.7)$$

Pour des systèmes fermés, si dW est le travail mécanique dû à une variation de volume dV :

$$dW_{\text{mécanique}} = -p \cdot dV \quad (2.8)$$

avec p est la pression sur la surface en mouvement.

On utilise plus souvent les enthalpies de chaque constituant qui sont composées en enthalpie de référence à T_0 et enthalpie sensible :

$$h(T) = h_f^0 + \int_{T_0}^T C_p(T) dt \quad (2.9)$$

Pour un système en régime, le premier principe s'écrit :

$$\Delta H_t = H_P - H_R$$

$$\Delta H_t = \sum_{s=1}^p n_s \left(h_f^0 + \int_{T_0}^{T_p} C_p(T) dt \right)_p - \sum_{s=1}^R n_s \left(h_f^0 + \int_{T_0}^{T_R} C_p(T) dt \right)_R \quad (2.10)$$

2.3.3 Second principe

Etant donné un système décrit par son volume, son énergie interne et sa quantité de matière de chacun de ses constituants, il existe une propriété de système l'entropie **S** qui se décompose en deux termes :

$$dS = dS_i + dS_e \quad , \quad dS_e = \frac{\delta Q}{T} \quad (2.11)$$

Le terme dS_e est lié aux échanges thermiques par la relation (2.11).

Le terme dS_i est lié aux modifications internes du système, il est constamment positif, et nul pour les transformations réversibles.

CHAPITRE 3. MODELISATION DE L'ÉCOULEMENT REACTIFS

3 Modélisation de l'écoulement réactif :

3.1 Gradient de Réactivité

3.1.1 Matériels et méthodes

La modélisation des flammes turbulentes prémélangées par la méthode de simulation permet d'analyser et de prédire le comportement des flammes dans des conditions réelles de combustion. Cela contribue à l'amélioration des processus industriels, à la réduction des émissions polluantes et à une meilleure compréhension des phénomènes de combustion, cela permet, d'économiser des ressources de calcul considérables tout en capturant les caractéristiques importantes de la turbulence, cette approche permet de mieux comprendre les mécanismes de combustion, les taux de réaction, les zones de mélange, les structures de flamme, les caractéristiques de l'écoulement turbulent et d'autres phénomènes clés pour prédire le comportement de la flamme.

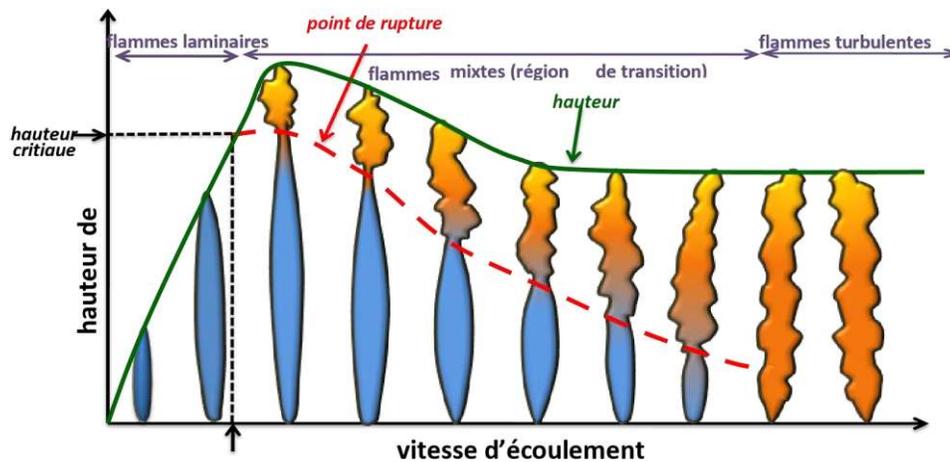


Figure 3.1 Hauteur et l'écoulement d'une flamme / Vitesse d'écoulement

3.1.2 Modèle mathématique:

Les résultats expérimentaux sont souvent couplés à des modèles numériques de combustion pour mieux comprendre les mécanismes réactionnels et optimiser les systèmes de combustion. Ce phénomène de combustion fait intervenir plusieurs disciplines scientifiques différentes, principalement la chimie, la thermodynamique et la mécanique des fluides. Il est donc essentiel d'utiliser un modèle de combustion approprié. En fonction du modèle choisi, les problèmes de non-

prémélange sont régis par les équations de la mécanique des fluides couplées à celles de la thermochimie [15].

Les équations régissant le comportement de ce modèle sont la conservation de la masse, la conservation du moment, de l'énergie et de la concentration en propane-oxygène pour un fluide compressible newtonien, appelés les équations de Navier-Stokes. En l'absence de forces volumiques externes, la généralisation de ces équations pour un écoulement réactif conduit au système d'équations suivant :

Equations de continuité :

Le bilan de masse totale ainsi que le bilan de chaque espèce s'écrivent :

$$\frac{f\rho}{ft} + \frac{f\rho}{fx_j}(\rho u_j) = 0 \quad (3.1)$$

avec u_i est la composante 'i' du vecteur vitesse,

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_j^k}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad \text{for } k=1\dots N \quad (3.2)$$

Y_k La fraction massique de l'espèce k,

$\dot{\omega}_k$ Son taux de réaction

J_j^k Représente le flux diffusif d'espèces donné par l'expression suivante :

$$J_j^k = -\rho D \frac{f(Y_k)}{fx_j} \quad (3.3)$$

D_k étant le coefficient de diffusion, la théorie de la diffusion d'un gaz dans un autre à basse pression résulte de la résolution de l'équation de Boltzmann [52.65]. Elle a été développée indépendamment par Chapman et Enskog, ils ont abouti à la relation suivante :

$$D_{AB} = 1.8583 \cdot 10^{-7} \frac{T^{3/2}}{PM_{AB}^{1/2} \sigma_{AB}^2 \Omega_D} [m^2/s] \quad (3.4)$$

Dans ce modèle, T représente la température ambiante, M les masses moléculaires des gaz, P la pression ambiante, σ_{AB} la longueur caractéristique de Lennard-Jones et ε/kB le paramètre d'énergie de Lennard-Jones [25.66].

Conservation de quantité de mouvement :

$$\frac{f}{ft}(\rho u_j) + \frac{f}{fx_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{fP}{fx_i} + \frac{f\tau_{ij}}{fx_j} \quad i=1,2,3 \quad (3.5)$$

avec P la pression telle que $p = R_0 T \sum_k \frac{\rho_k}{w_k}$, ρ_k et w_k sont la masse volumique et la masse molaire de

l'espèce k. τ_{ij} le tenseur de contraintes visqueuses est donné par la loi de Newton :

L'énergie totale est la somme de l'énergie interne, de l'énergie cinétique et de l'énergie chimique.

Soit ($E=e_i+e_c$) l'énergie totale non chimique. On a alors :

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{f u_i}{f x_j} + \frac{f u_j}{f x_i} \right] - \frac{2\mu}{3} \left[\frac{f u_k}{f x_k} \right] \delta_{ij} \quad (3.6)$$

Dans ce modèle, ' μ ' représente viscosité dynamique du mélange, ' δ_{ij} ' est le delta de Kronecker.

Équation d'énergie :

L'énergie totale est la somme de l'énergie interne, de l'énergie cinétique et de l'énergie chimique.

Soit ($E=e_i+e_c$) l'énergie totale non chimique. On a alors :

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i E}{\partial x_i} = \dot{\omega}_T - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial (\tau_{ij} - p) u_i}{\partial x_j} \quad (3.7)$$

avec $\dot{\omega}_T$ représente le taux de dégagement de chaleur tandis que ' $\frac{f q_j}{f x_j}$ ' est le flux de chaleur, ' $\frac{f (\tau_{ij} - p) u_i}{f x_j}$ '

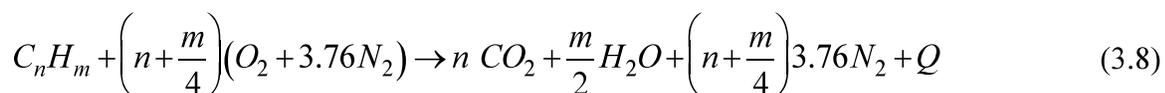
est la puissance des forces visqueuses et de pression.

On note que les équations de thermochimie introduites permettent de modéliser les phénomènes de combustion. En couplant ces équations avec les équations de la mécanique des fluides, il est possible de modéliser de manière réaliste les interactions complexes entre les différents processus physiques et chimiques qui se produisent lors de la combustion.

Les propriétés de la combustion résultent de l'action conjuguée des processus chimiques (production rapide de chaleur et d'espèces chimiques réactives), physiques (transport, diffusion), ainsi que de déplacement de matière et de chaleur [4]. les propriétés d'une combustion sont déterminées par une multitude de facteurs, qui interagissent de manière complexe. La compréhension de ces facteurs est essentielle pour maîtriser et optimiser les processus de combustion dans de nombreux domaines. [2,3].

Équation de continuité :

La réaction chimique globale de combustion d'un hydrocarbure ($C_n H_m$) peut s'écrire :



'Q' est la quantité de chaleur dégagé par la combustion stœchiométrique.

Par contre pour la combustion non stœchiométrique elle est caractérisée par d'autres paramètres tels que le taux de dilution ' α ' et le coefficient d'excès d'air 'f'.

La résolution de ces équations permet de connaître en tout point et à tout instant la composition, la température et la pression du mélange du gaz réactif. En ce qui concerne l'état thermochimique du mélange, elle est déterminée par deux paramètres, la fraction massique du carburant et la fraction du mélange. Si les parois des systèmes étudiés sont considérés adiabatiques et imperméables aux espèces, alors on peut définir la fraction du mélange, notée x [5] qui représente à la fois l'évolution de l'enthalpie 'h' et de la fraction massique de n'importe quelles espèces, on a :

$$\xi = \frac{(Y - Y_1)}{(Y - Y_2)} + \frac{(h - h_1)}{(h_2 - h_1)} \quad (3.9)$$

Les indices caractérisent respectivement l'oxydant et le combustible. Cette expression stipule que $\xi = 0$ dans l'oxydant pur et $\xi = 1$ dans le combustible pur.

La deuxième loi de Fick exprime le régime transitoire où l'on suppose $\frac{f\rho}{ft} \ll 0$

La variation de la concentration en fonction du temps est alors définie par l'équation :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -D_{AB} \left(\frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \rho}{\partial z^2} \right) \quad (3.10)$$

La diffusion est un phénomène spontané, irréversible et incontournable qui se traduit par la migration d'espèces chimiques dans un milieu. Sous l'effet de l'agitation thermique et de la différence de concentration, on observe un déplacement des constituants conduisant à un équilibre, ce phénomène est régi par une loi énoncée par Adolf Fick et porte son nom [7].

Dans ce qui suit, on s'intéresse initialement à la résolution de la loi de Fick afin de calculer la concentration du mélange on note que cette concentration d'un réactif dans un milieu réactionnel, en particulier lors d'une combustion, est une grandeur qui évolue dans le temps et dans l'espace. Cette évolution est gouvernée par les équations de la diffusion, de la convection et de la réaction chimique., de plus, les résultats obtenus par simulation sont utilisés expérimentalement, puis, utilisés en deuxième étape comme paramètres dans les équations de Navier-Stokes présentées ci-dessus. La solution obtenue permet de décrire le mécanisme de combustion par le biais de la propagation de la flamme, sa vitesse et l'augmentation de sa pression lorsque la flamme traverse ces gradients.

Avec les conditions aux limites suivantes,

$$\left. \begin{array}{l} \frac{fC}{fx} \\ \frac{fC}{fx} \end{array} \right|_{x=0} = 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{fC}{fx} \\ \frac{fC}{fx} \end{array} \right|_{x=1} = 0$$

et la condition initiale suivante $C(x,0) = \begin{cases} C_1 & \text{si } x \in [0, 0.5[\\ C_2 & \text{si } x \in]0.5, 1] \end{cases}$

3.1.3 Mécanismes de formation des gradients de réactivité

La répartition de gaz dans un nuage atmosphère dépend des mécanismes physiques qui donnent naissance à l'atmosphère inflammable. Dans le cas d'un jet de gaz combustible dans l'atmosphère, la formation du nuage explosif est régie par la diffusion turbulente. En espace fermé, la diffusion moléculaire pourrait éventuellement être le mécanisme principal du mélange.

3.1.4 Diffusion moléculaire

La diffusion moléculaire est la migration spontanée, en l'absence de convection, d'une espèce d'une région où sa concentration est élevée vers une région où sa concentration est moindre. Cette redistribution dans l'espèce provient du mouvement brownien des particules.

Fick a proposé un modèle de diffusion s'appuyant sur l'analogie entre le phénomène de diffusion de particules à l'échelle caractéristique des gradients de réactivité de l'ordre, $L=(D.t)^{1/2}$ et celui de chaleur :

Les variables utilisées dans ce calcul sont :

D est le coefficient de diffusion en m^2/s

C : est la concentration en $mol.m^{-3}$

t : est le temps en seconde.

Les théories thermodynamiques statistiques proposent des expressions pour estimer le coefficient « D » qui est de l'ordre de ($10^{-5} m^2/s$) si bien que des temps de l'ordre de l'heure sont nécessaires pour faire apparaître des gradients de quelques centimètres.

3.2.2 Diffusion atmosphérique :

La diffusion atmosphérique est un phénomène de transport de matière induit par turbulence de l'atmosphère.

Ce processus est un phénomène microscopique qui désigne le mécanisme naturel d'un système à rendre homogènes les concentrations des espèces chimiques en son sein et se caractérise par un transfert de matière, qui est la réponse d'un milieu à toute modification de la répartition des concentrations.

Même à l'équilibre, les échanges de matière se poursuivent continuellement à l'échelle moléculaire, on parle alors d'auto-diffusions.

On distingue deux types de transfert de matière :

- Transfert de matière par diffusion
- Transfert de matière par convection.

Dans ce chapitre, nous restreindrons notre champ d'étude à la diffusion en termes physico-chimiques de fractions massiques appliquée à un tube fermé de section carrée divisé par une paroi en deux chambres contiennent deux mélanges de composition différentes soumis à la même pression afin d'évaluer la distribution des fractions massiques à chaque instant et à chaque position le long de tube. Ces résultats seront utilisés dans les chapitres suivants pour modéliser la combustion.

3.2.3 Présentation du domaine d'étude :

Notre champs d'étude consiste en un tube long d'une hauteur de « $2l$ » ($l = 0.5m$), et d'une section carrée de dimension « a » ($a = 0.03m$), ce tube est constitué de deux chambres de même volume séparée par une paroi (clapet).

100 cm
90 cm
80 cm
60 cm
55 cm
50 cm
45 cm
35 c
25 cm
10cm
5 cm

Figure 3.2 Dispositif de visualisation

Les deux chambres sont soumises à la même pression totale $P_t = 1 atm$, dans un milieu fermé et à température uniforme $T = 298.15 K$ Figure (3.1)

Les deux chambres contiennent deux mélanges M_1 et M_2 de composition et fraction massique différentes (Tableau.3.1), on distingue deux cas :

Tableau 3-1 Configuration expérimentale.

Mélanges		
1 ^{ère} Cas	M1	100% O ₂
	M2	100% C ₃ H ₈
2 ^{ème} Cas	M1	100% C ₃ H ₈
	M2	100% O ₂

Tableau 3.1 présente notre configuration expérimentale.

Elle consiste en un tube divisé en deux chambres égales de même volume, séparées par une membrane (une valve). Les deux chambres ont la même pression totale $P_t = 1$ atm et sont à une température uniforme de $T = 298,170$ K. Elles contiennent deux mélanges, M_1 et M_2 , de compositions et de fractions massiques différentes, introduits dans la zone de combustion par amorçage au fond du tube après un délai de diffusion. L'expérience est réalisée selon deux cas présentés dans le tableau 3.1.

L'outil expérimental spécifique présenté ici concerne le contrôle de la formation de mélanges hétérogènes et ouvre la voie à un nouvel ensemble de mécanismes de propagation et d'accélération de la flamme pour ces mélanges. Notre structure proposée est une innovation expérimentale. Elle est adaptée aux conditions d'un tube droit transparent à section carrée fermée, choix motivé par plusieurs raisons :

- Il favorise la visualisation de la flamme et permet l'obtention de diverses mesures grâce à des capteurs.
- Il permet également un excellent contrôle des gradients de concentration en favorisant, moyennant certaines précautions, les mécanismes de mélange par diffusion moléculaire.

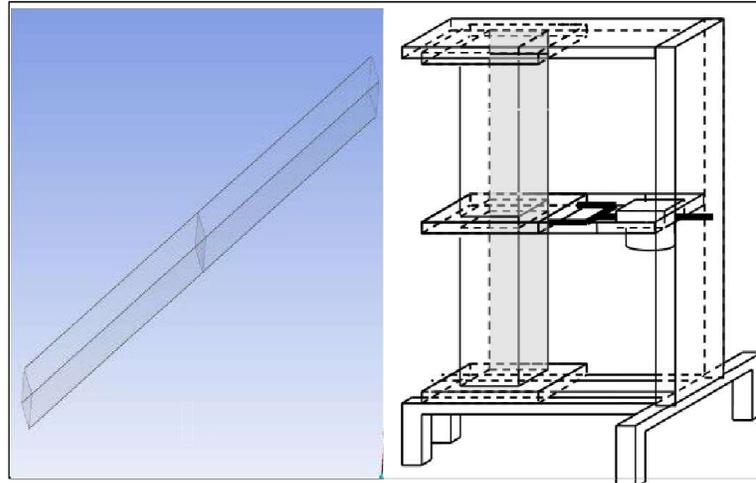


Figure 3.3 Schéma de dispositif expérimental

3.2.4 Propriétés des mélanges :

On s'intéressera dans ce paragraphe aux propriétés thermodynamiques des mélanges de gaz, et plus particulièrement des mélanges de gaz parfaits.

Mélanges de gaz :

Soit un mélange de n_s constituants, chacun étant une substance pure. La masse et le nombre de moles totaux sont respectivement données :

Par la masse molaire du mélange

Ou par la fraction massique

Ou par la fraction molaire

Ou par la fraction molaire

$m = m_1 + m_2 + \dots + m_{s_n} = \sum m_s$	(3.12)
$n = n_1 + n_2 + \dots + n_{s_n} = \sum n_s$	
$z_s = \frac{n_s M_s}{\sum n_s M_s} = \frac{y_s M_s}{\sum y_s M_s}$	
$y_s = \frac{n_s}{n} = \frac{m_s / M_s}{\sum m_s / M_s} = \frac{z_s / M_s}{\sum z_s / M_s}$	
$\frac{V_s}{V} = \frac{n_s}{n} = y_s$	

Le résultat connu sous le nom de loi de Dalton se traduit par la prise en compte de plusieurs quantités des gaz de natures différentes, avec une pression et une température identiques.

On les met en contact, et on les laisse diffuser jusqu'à ce qu'ils forment un mélange homogène.

Ce faisant, on constate que les deux lois de Fick sont vérifiées.

3.2.5 Mise en équations générales :

3.2.5.1 Hypothèses :

- ✓ Les gaz suivent la loi des gaz parfaits
- ✓ La combustion s'effectue à volume constant
- ✓ Le mélange gazeux est divisé en N tranches ayant la même masse
- ✓ La chaleur spécifique à pression constante des gaz parfaits est supposée constante
- ✓ La pression est la même en tout point de la chambre à chaque instant
- ✓ Mise en équations générales Equations simplifiées :

Conditions aux limites et conditions initiales

Schéma numérique

Critères de stabilité et de convergence Résultats

Première loi des mélanges :

Cette loi applique le principe des gaz parfaits appelée la loi de BOYLE-MARIOTTE, par effet qu'il n'y a ni variation de volume ni de température.

Deuxième loi des mélanges :

L'énergie interne d'un mélange des gaz parfaits est égale à la somme des énergies internes de chacun des constituants à la même température.

$$U = \sum U_s = \sum n_s u_s \quad (3.13)$$

La pression partielle d'un constituant :

Considérons un mélange de gaz parfait de composition connue à une pression p et une température T données et occupant un volume V donné. Si chaque constituant était seul à occuper le volume, sa pression vaudrait :

$$p_s V = n_s R T = p V_s \quad (3.14)$$

Définition de la diffusion :

La diffusion est le transport microscopique (une migration) de masse comme les atomes, les molécules et les ions dans un milieu sous l'effet des différences de concentration, depuis les zones concentrées en matière vers les zones moins concentrées. C'est un phénomène spontané, irréversible et incontournable (phénomène dispersif) conduisant à un équilibre, se produisant par suite de l'agitation thermique des molécules[31].

Au sens large, la diffusion désigne des transferts obéissants aux lois de Fick, s'il existe une différence de concentration dans l'espace, par exemple entre deux compartiments séparés par une membrane perméable (laissant passer le solvant comme le soluté). Suivant le gradient de concentration, la matière va se déplacer spontanément depuis la zone de concentration élevée vers la zone de concentration faible, conformément à ce qui est représenté sur la Figure. (3.2)[32].

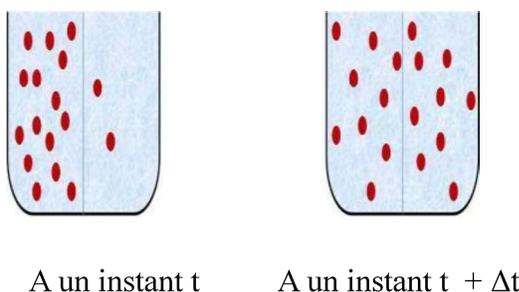


Figure 3.4 Schéma présentatif de phénomène de diffusion [28].

Lorsqu'un atome se déplace parmi des atomes de même nature, on parle d'autodiffusion. Par exemple, on parlera d'autodiffusion du fer pour désigner la migration d'un atome de fer dans un cristal de fer. Lorsque l'on a deux milieux homogènes différents que l'on met en contact, on parle d'inter-diffusion.

3.3 Modélisation du gradient de réactivité :

3.3.1 Equations de diffusion.

L'étude du phénomène de diffusion par la théorie cinétique a établi l'équation de Fick, modèle agrégé de la diffusion brownienne (Fick, 1855). On s'intéresse ici uniquement à la composante le long de l'axe des abscisses (x) :

Deux méthodes existent pour résoudre une équation différentielle. La première consiste à intégrer l'équation analytiquement. La deuxième passe par une résolution numérique utilisant un schéma d'intégration approprié.

Lorsque l'on connaît la concentration initiale et les limites de l'espace, il est possible de calculer la solution de l'équation de Fick analytiquement :

Cependant, si on suppose que le coefficient de diffusion est variable dans l'espace, la solution analytique n'est pas toujours calculable. Il faut alors utiliser une résolution numérique de l'équation à coefficient variable et à pas constant (Dautray et Lions, 1984), en discrétisant l'espace et le temps

Première loi de Fick :

La première loi de Fick énonce que le flux de diffusion est proportionnel au gradient de concentration.

Cette loi est inspirée de la loi de Fourier sur la conduction de la chaleur. Elle peut être vue

comme une définition du « vecteur densité de courant » \vec{J}_i qui vérifie la seconde loi de Fick, en ce sens qu'elle ne contient pas la physique du phénomène de diffusion.

Mathématiquement, cette loi s'exprime de la manière suivante :

- Soit un milieu B dans lequel se trouve une espèce chimique A, soit une surface S ;
- Si $C_A(x, y, z, t)$ est la concentration de A en un point donné ;
- On appelle \vec{j}_A (molécule $s^{-1}m^{-2}$) le « vecteur densité de courant de particules » des particules de A ;
- La première loi de Fick s'écrit :

$$\vec{j}_A = -D_{AB} \cdot \vec{\text{grad}} C_A$$

Également notée, avec l'opérateur nabla :

$$\vec{j}_A = -D_{AB} \cdot \vec{\nabla} C_A$$

La grandeur D_{AB} (m^2s^{-1}) est le coefficient de diffusion de A dans le milieu B considéré ; il dépend de la température, du milieu et de A.

$$j_{A_z} = -D_{AB} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial z}$$

À une dimension (par exemple en se plaçant sur l'axe des z), cette équation devient :

Ce vecteur donne accès au flux de particules de 'A' à travers une surface S quelconque, c'est-à-dire le nombre de particules de 'A' traversant cette surface par unité de temps :

Si on note φ_A ce flux, on a la seconde loi de Fick

La loi de la conservation des espèces indique que l'opposé de la variation par unité de temps de la quantité de particules(i):

$$\iiint C_i \cdot dV$$

Dans un volume donné V est égale au flux sortant du vecteur densité de courant de particules

$$\iint \vec{j}_i \cdot d\vec{S}$$

\vec{j}_i à travers la surface fermée S délimitant le volume V.

$$-\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V C_i \cdot dV = \iint_S \vec{j}_i \cdot d\vec{S} = \iiint_V \text{div} \vec{j}_i \cdot dV$$

On obtient la deuxième loi de Fick en identifiant les intégrants ci-dessous :

$$\varphi_A = \iint_S \vec{j}_A \cdot d\vec{S}$$

3.3.2 Présentation du problème :

La seconde équation de Fick exprime en tout point x la variation temporelle de la concentration $C(x, t)$ en fonction de sa variation spatiale au voisinage de ce point.

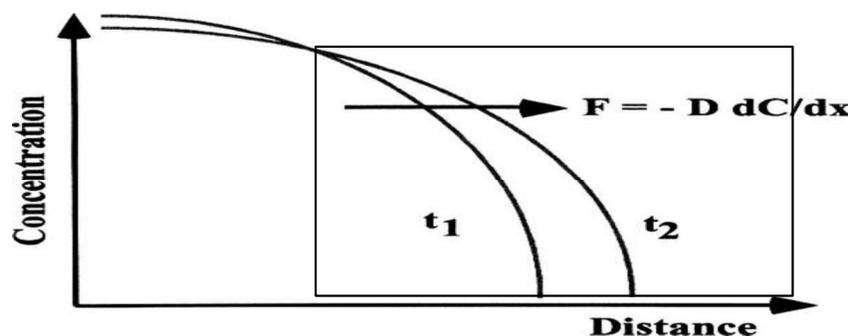


Figure 3.5 Schéma présentatif de phénomène de diffusion [28].

La deuxième loi de Fick exprime non plus un régime permanent de diffusion, mais un régime transitoire ou l'on suppose $\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$.

La variation de la concentration en fonction du temps est alors définie par la relation :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} \quad (3.17)$$

La deuxième équation de Fick décrit comment le changement dans la concentration dans un élément de volume est déterminé par le changement (variation) dans le flux entrant et le flux sortant dans le volume Figure (3.4).[12]

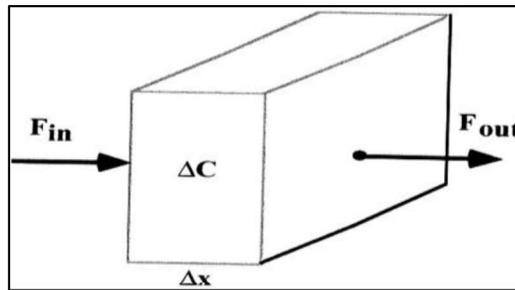


Figure 3.6 Schéma présentatif de phénomène de diffusion [28].

La deuxième équation de Fick est une équation aux dérivées partielles du second ordre de type parabolique, qui caractérise un processus irréversible. Elle intervient ainsi dès que l'on s'intéresse à la diffusion en tant que processus spatio-temporel. Elle est pratiquement impossible à résoudre analytiquement. Par contre si D est indépendant de la concentration, elle se simplifie notablement. L'équation (1-15) s'écrit alors :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.19)$$

C'est la seule forme de la deuxième loi de Fick qui peut être analytiquement résolue. On pourra considérer un nombre fini de solutions. Les solutions analytiques de l'équation (3.19) décrivent mathématiquement la forme du profil de concentration $C(x,t)$ au cours du temps. Ces solutions permettent d'extraire le coefficient de diffusion D en ajustant le modèle théorique aux données expérimentales.

3.3.3 Solution de l'équation de diffusion

3.3.3.1 Solution analytique

L'équation générale de la diffusion est une équation aux dérivées partielles du second ordre. Elle ne peut être résolue analytiquement tant que D dépende de la concentration, et donc de x et t . Mais elle se simplifie notablement si « D » est indépendant de la concentration, un cas réalisé notamment avec des systèmes qui restent chimiquement homogènes (autodiffusion, par exemple).

Cette équation est souvent qualifiée improprement de seconde loi de Fick. Il existe des expressions analytiques différentes suivant les conditions initiales et aux limites du problème. Ces solutions expriment la forme du profil de diffusion $c(x, t)$ et permettent de calculer le coefficient de diffusion D à partir des profils expérimentaux.

On pose :

$$C(x, t) = X(x).T(t) \quad (3.20)$$

En remplaçant cette dernière expression dans l'équation (3.19) :

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} X(x) = D \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} T(t) \quad (3.21)$$

$$\frac{\frac{dT(t)}{dt}}{T(t)} = D \frac{\frac{d^2 X(x)}{dx^2}}{X(x)} \quad (3.22)$$

Le terme à gauche de (3.22) ne dépend que du temps t , et le terme à droite ne dépend que de x (c'est pour cela on a remplacé l'opérateur : \square par d), alors l'égalité précédente n'a lieu que si les deux termes sont égaux à une constante. On la note $-\beta^2$ (elle est strictement négative) pour des considérations intuitives et pour avoir une solution en terme physique (par exemple : la concentration doit se diminuer avec le temps et ne pas croître indéfiniment.) On a alors :

$$\frac{1}{D} \frac{dT(t)}{T(t)} = \frac{d^2 X(x)}{X(x)} = -\beta^2 \quad (3.23)$$

Et si on abrège la notation, on obtient le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{\dot{T}(t)}{T(t)} = -D\beta^2 \\ \frac{X''(x)}{X(x)} = -\beta^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \dot{T}(t) + D\beta^2 T(t) = 0 \\ X''(x) + \beta^2 X(x) = 0 \end{cases} \quad \begin{matrix} (**) \\ (*) \end{matrix}$$

L'équation (*) est une équation différentielle du premier ordre dont la solution est donnée par :

$$T(t) = e^{-\beta^2 D t} \quad (3.25)$$

$$\Rightarrow X'(x) = 0 \rightarrow X(x) = cte$$

L'équation (**) est une équation différentielle du seconde ordre dont la solution est donnée par :

$$X(x) = A \cos(\beta x) + B \sin(\beta x) \tag{3.26}$$

En dérivant : $X'(x) = -A\beta \sin(\beta x) + B\beta \cos(\beta x)$

Pour déterminer les constantes A et B : on utilise les conditions aux limites :

$$C_x(0, t) = 0 \Rightarrow X'(0).T(t) = 0 \Rightarrow X'(0) = 0$$

On alors :

$$B\beta = 0$$

Nous avons deux cas :

$$\text{Si } \begin{cases} B \neq 0 \\ \text{et} \\ \beta = 0 \end{cases} \Rightarrow X(x) = cte \text{ (solution triviale)}$$

Alors : $\begin{cases} B = 0 \\ \text{et} \\ \beta \neq 0 \end{cases} \Rightarrow X(x) = A \cos(\beta x)$

$$C_x(2, t) = 0 \Rightarrow X'(2).T(t) = 0 \Rightarrow X'(2) = 0$$

On a donc :

$$X' = -A\beta \sin(2\beta) = 0$$

D'après la première condition aux limites :

$$\beta = 0$$

Donc : Si $\begin{cases} A\beta = 0 \text{ autrement dit } (A = 0) \\ \text{et} \\ \sin(2\beta) \neq 0 \end{cases} \Rightarrow X'(x) = 0 \rightarrow X(x) = cte \text{ (solution triviale)}$

Alors : $\begin{cases} A\beta \neq 0 \\ \sin(2\beta) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} X_n(x) = \cos(\beta_n x) \\ \text{avec: } \beta_n = \frac{n\pi}{2} \end{cases}$

Donc, la distribution des concentrations s'écrit de la forme suivante :

$$C(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos \beta_n x e^{-\beta_n^2 D t} \tag{3.27}$$

Pour calculer les A_n , on utilise la condition initiale et la propriété d'orthogonalité :

$$C(x, 0) = f(x) = \begin{cases} C_1 \text{ si } x \in [0, 0.5[\\ C_2 \text{ si } x \in]0.5, 1] \end{cases}$$

$$C(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos \beta_n x = \begin{cases} C_1 & \text{pour: } 0 \leq x < 0.5 \\ C_2 & \text{pour: } 0.5 < x \leq 1 \end{cases}$$

Pour cela, appliquer la propriété d'orthogonalité des fonctions propres $X_n(x)$:

$$X_n(x) = \cos(\beta_n x), \quad , \quad \beta_n = \frac{n\pi}{2}$$

Fonctions propres sur $[0,0.5[$ et $]0.5,1]$

$$\text{C'est-à-dire } \int_0^1 [\cos(\frac{n\pi}{2}x) \cdot \cos(\frac{m\pi}{2}x)] \cdot dx = \begin{cases} 0, & \text{pour } n \neq m \\ \neq 0 & \text{pour } n = m \end{cases}$$

$$\int_1^2 [\cos(\frac{n\pi}{2}x) \cdot \cos(\frac{m\pi}{2}x)] dx = \begin{cases} 0, & \text{si } n \neq m \\ \neq 0 & \text{pour } n = m \end{cases}$$

Pour vérifier on utilise les relations trigonométriques suivantes : [13]

$$\cos(mx) \cos(nx) = \frac{1}{2} [\cos(m-n)x + \cos(m+n)x]$$

$$\sin(n+m)x = [\sin(nx) \cos(mx) + \cos(nx) \sin(mx)]$$

$$\sin(n-m)x = [\sin(nx) \cos(mx) - \cos(nx) \sin(mx)]$$

Donc :

$$A_n = \frac{\int_0^1 C_1 \cos(\beta_n x) dx}{\int_0^1 \cos^2 \beta_n x dx} + \frac{\int_1^2 C_2 \cos(\beta_n x) dx}{\int_1^2 \cos^2 \beta_n x dx} = \frac{2(C_1 - C_2)}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \quad (3.28)$$

Finalement, on applique le théorème des fonctions discontinues, on obtient l'expression de $C(x, t)$.

$$C(x, t) = \frac{C_1 + C_2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(C_1 - C_2)}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \cos \beta_n x e^{-\beta_n^2 D t} \quad (3.29)$$

Après un développement et une analyse assez profonde, On peut déduire d'après la formule de la concentration que les variations de cette dernière le long de l'axe x est une fonction trigonométrique, qui est une fonction paire, ce qui implique une symétrie par rapport à l'axe y.

Donc, la distribution de la concentration le long de l'axe y est uniforme.

3.3.4 Méthodes numériques pour la résolution de l'équation de la diffusion

Les problèmes physiques rencontrés dans notre quotidien sont décrits par des équations à dérivées partielles fortement couplées et non linéaires. En général, ces équations n'admettent pas de solutions analytiques sauf dans des cas très simplifiés. C'est pourquoi un recours aux méthodes de résolution numériques est nécessaire. Il existe plusieurs méthodes numériques :

- méthode des différences finies,
- méthode des éléments finis, - méthode des volumes finis.

Chaque méthode de résolution numérique d'un problème continu comporte une phase de maillage et une phase de discrétisation.

La phase de maillage consiste à diviser le domaine d'étude en de petits volumes appelés volumes de contrôle.

La discrétisation consiste à approcher un problème continu par un problème discret en remplaçant les dérivées par des différences finies et en subdivisant le domaine en un nombre fini de points.

- Schéma numérique :

La méthode des éléments finis est utilisée pour résoudre numériquement des équations aux dérivées partielles.

Celles-ci peuvent par exemple représenter analytiquement le comportement dynamique de certains systèmes physiques (mécaniques, thermodynamiques, acoustiques).

Dans notre cas nous utilisons le schéma explicite à différentielle directe première(F.F.D)

Discrétisation :

Le domaine est discrétisé en un maillage structuré composé de $m \times n$ éléments rectangulaires. Le pas de discrétisation est de $\Delta y = \frac{0.3}{m}$ selon l'axe y et de $\Delta x = \frac{2}{n}$ selon l'axe x. Figure (3.5)

Développement

La discrétisation de l'équation de la diffusion en 2D à un nœud i donne :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (3.30)$$

Traitement du terme de la dérivée temporelle

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_i = \frac{1}{\Delta t} (C_i^{k+1} - C_i^k) \quad (3.31)$$

Sachant que :

i : indice de nœud.

k : indice de temps.

Traitement du terme de la dérivée spatiale

Selon l'axe x :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right)_i &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_i = \frac{\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} - \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x} = \frac{\frac{C_{i+1}^k - C_i^k}{\Delta x} - \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{1}{\Delta x^2} (C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k) \end{aligned} \quad (3.32)$$

D'après la Figure (3.7) qui schématise notre problème, on peut écrire :

$$\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right)_i = \frac{1}{\Delta x^2} (C_{i+m}^k - 2C_i^k + C_{i-m}^k) \tag{3.33}$$

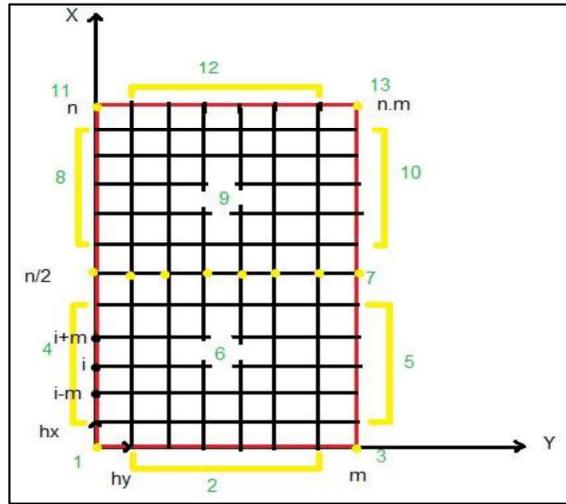


Figure 3.7 la Discrétisation 2d et les points singuliers

$$\begin{bmatrix} 1+2r & -2r & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -r & 1+2r & -r & 0 & & \dots & \vdots \\ 0 & -r & \ddots & \ddots & 0 & & \vdots \\ & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \vdots & & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & -r \\ 0 & \dots & 0 & -2r & 1+2r & & \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} C_1^{k+1} \\ C_2^{k+1} \\ C_3^{k+1} \\ \vdots \\ C_i^{k+1} \\ \vdots \\ C_N^{k+1} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_1^k \\ -C_2^k \\ -C_3^k \\ \vdots \\ -C_i^k \\ \vdots \\ C_N^k \end{Bmatrix} \tag{3.3.4.1}$$

Critères de stabilité et de convergence :

La convergence, la stabilité et la consistance sont des concepts clés qui permettent de relier la solution mathématique exacte d'une équation aux dérivées partielles à sa solution numérique approchée obtenue par discrétisation.. Ces différents liens, résumés sur la Figure (3.6), sont:

La stabilité : c'est la propriété qui assure que la différence entre la solution numérique obtenue et la solution exacte des équations discrétisées est bornée.

La consistance : c'est la propriété qui assure que la solution exacte des équations discrétisées tende vers la solution exacte des équations continues lorsque le pas de discrétisation (Δt et Δx) tendent vers zéro.

La convergence : c'est la propriété qui assure que la solution numérique tende vers la (ou une) solution exacte des équations continues. C'est évidemment la propriété la plus recherchée.

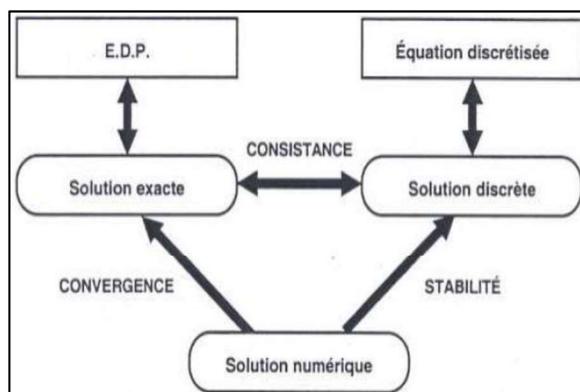


Figure 3.8 la Discrétisation 2d et les points singuliers

D'après le théorème de Lax qui affirme que pour un problème bien posé, et avec un schéma numérique consistant, la stabilité est une condition nécessaire et suffisante pour la convergence afin d'éviter l'évolution exponentielle des erreurs.

Dans notre cas la condition est :

$$r_x + r_y < \frac{1}{2} \quad \text{c. à. d.} \quad \frac{\Delta t}{\Delta x^2} + \frac{\Delta t}{\Delta y^2} < \frac{1}{2} \quad (3.37)$$

3.3.4.2 Le coefficient de diffusion de matière :

La diffusivité massique est l'une des propriétés liées aux transferts de matière caractérise l'aptitude d'un matériau à laisser migrer les molécules diffusantes. Bien que la diffusivité massique soit un concept fondamental en science, elle trouve de nombreuses applications pratiques.

Ce coefficient, spécifique à deux espèces, est comparable à la diffusivité thermique (loi de Fourier) et à la viscosité cinématique (loi de Newton)." Bien que la diffusivité massique soit un concept fondamental en science, elle trouve de nombreuses applications pratiques. Ce coefficient, spécifique à deux espèces, est comparable à la diffusivité thermique (loi de Fourier) et à la viscosité cinématique (loi de Newton)." [15].

3.3.4.2.1 Ordre de grandeur de diffusion :

Le coefficient de diffusion quantifie la vitesse à laquelle un gradient de concentration s'atténue par diffusion. Bien que la température ait généralement un effet positif sur la diffusivité, les gaz présentent une particularité : leur diffusivité est principalement influencée par la pression et est relativement insensible aux variations de composition.

Les tableaux 3.2 illustrent ces tendances en présentant des valeurs numériques pour différents systèmes [16].

TABLEAU 3-2 ORDRE DE GRANDEUR COEFFICIENT DE DIFFUSION EN (M²/S).[33]

gaz	Vitesse moléculaire moyenne (m/s)	Libre parcours moyen λ (10 ⁻⁹ m)	Coefficient de diffusion 10 ⁻⁵
N ₂	671.4824	95.1544	2.1298
O ₂	628.2763	98.9476	2.0722

3.3.4.2.2 Coefficient de diffusion en phase gazeuse

3.3.4.3 Théorie cinétique des gaz :

Dans le cas d'un mélange binaire gazeux non-polaire composé d'espèces isotopiques (même masse, taille et forme), la théorie cinétique des gaz offre une prédiction du coefficient de diffusion avec une incertitude relative de l'ordre de 5%.

On supposera, en outre, que ces molécules sont des sphères rigides de diamètre d_A et que la concentration volumique est suffisamment faible pour que la distance moyenne entre molécules soit plusieurs fois supérieure à d_A . On arrive à :

Tableau 3-3 Ordre de grandeur coefficient de diffusion en (m²/s).[33].

Gaz (sous pression atmosphérique)	10 ⁻⁴ - 10 ⁻⁶
Liquide	10 ⁻⁸ - 10 ⁻¹⁰
Liquide diffuse dans un solide	10 ⁻⁸ - 10 ⁻¹²
Polymères et verre	10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻¹⁴
Solide	10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻³⁴

$$D_{AA'} = \frac{2}{3} \frac{K_B T}{\pi^2 m_A} \frac{1}{d_A^2} \quad (3.39)$$

K_B : Constante de Boltzmann ($K_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{J} \cdot \text{K}^{-1}$).

N_A : Nombre d'Avogadro égal à $6.022140857 \cdot 10^{23} \cdot \text{mol}^{-1}$.

Vitesse moléculaire moyenne et coefficient de diffusion :

TABLEAU 3-4 VITESSE MOLECULAIRE MOYENNE ET COEFFICIENT DE DIFFUSION.

Atomes	Température (K)	Rayon atomique (10^{-10}m)	Masse molaire (g. mol^{-1})
Azote(N)	298.15	1.55	14.0067
Oxygène(O)	298.15	1.52	15.9994

Dans le cas de sphères rigides A et B de différentes masses et différents diamètres, le calcul coefficient de diffusion D_{AB} est plus compliqué :

$$D_{AB} = \frac{2}{3} \left(\frac{K_B^3}{\pi^3} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{1}{2m_A} + \frac{1}{2m_B} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{T^{\frac{3}{2}}}{p \left[\frac{(d_A^2 + d_B^2)}{2} \right]^2} \quad (3.40)$$

Remarque :

Les équations (3.39) et (3.40) sont en accord avec les données expérimentales jusqu'à 10 bars.

Les équations (3.39) et (3.40) sont en accord avec les données expérimentales jusqu'à 10 bars.

$$\frac{D_{AB}(P, T)}{D_{AB}(P_0, T_0)} = \frac{P_0}{P} \left[\frac{T}{T_0} \right]^{3/2} \quad (3.41)$$

En tenant compte de la nature dissimilaire des molécules A et B et des forces qui s'exercent entre elles, la théorie de Chapman-Enskog permet de déterminer quantitativement la vitesse à laquelle les molécules A se diffusent dans le milieu B:

$$D_{AB} = 1.8583 \cdot 10^{-7} \cdot \frac{T^{\frac{3}{2}}}{p \sigma_{AB}^2 \Omega_{D_{AB}}} \cdot \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.42)$$

Avec :

M_A, M_B : Masse molaire de A et B (g/mol).

σ_{AB} : Paramètre de Lennard-Jones(Å).

$\Omega_{D_{AB}}$: La fonction ou 'le potentiel' de Lennard-Jones.

Le potentiel de Lennard-Jones $\Omega_{D_{AB}}$ est une fonction de la température T et de l'énergie d'interaction moléculaire ε_{AB} [17].

$$\Omega_{D_{AB}} = 1.06036(T^*)^{-0.1561} + 0.193e^{(-0.47635T^*)} + 1.03587e^{(-1.52996T^*)} + 1.76474e^{(-3.89411T^*)}$$

Avec : $T^* = \frac{K_B T}{\varepsilon_{AB}}$,

ε_{AB} : Énergie d'attraction moléculaire (J) $\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_A \cdot \varepsilon_B}$

L'énergie d'attraction moléculaire ε_A et ε_B est estimée à partir de la formule empirique suivante :

Paramètre de Lennard-Jones σ_{AB} est la distance intermoléculaire de collision entre A et

B. $\sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_A + \sigma_B)$

Remarque :

L'équation(3.42) est connue sous le nom de l'équation de Bird-Hirschfelder-Curtis (1954) dont le domaine de validité est ($0 < p < 2$ atm) et ($200 < T < 1000$ K), (8% d'erreur)[18].

que $D_{AB} = D_{BA}$ et que D_{AB} ne dépend pas de la composition, ce qui est observé pour la plupart des mélanges gazeux binaires sous faible pression.

TABLEAU 3-5 CARACTERISTIQUES DE L'HYDROGENE ET DE CARBONE.

Atome	Masse molaire (g/mol)	T_{eb} (K)	V_m ($m^3/kmol$)	σ_i	$\frac{\varepsilon_i}{K_B}$ (K)
Carbone(C)	12.0107	5100.15	418.4815	8.7214	6171.1815
Hydrogène(H)	1.00794	20.25	1.6615	1.3810	24.5025

TABLEAU 3-6 COEFFICIENT DE DIFFUSION DE PROPANE (C₃H₈) A T=298.15.

	Température (K)	σ_{CH}	$\frac{\varepsilon_{CH}}{K_B}$ (K)	T^*	Ω_{DCH}	coefficient de diffusion 10^{-5} (m^2/s)
C ₃ H ₈	298.15	5.0512	388.8564	0.7667	1.6488	2.3581

Relations semi-empiriques :

A cause de la nature complexe des relations précédentes, un certain nombre de relations empiriques sont proposées dans la littérature.

1. Equation de Fuller, Schettler et Giddings

Cette équation est basée sur des données expérimentales et fournit des estimations raisonnables des coefficients de diffusion dans de nombreux cas (La précision de cette corrélation est de 20%) [19] :

$$D_{AB} = 1.01 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{T^{1.75}}{p(\sum V_A^{1/3} + \sum V_B^{1/3})^2} \cdot \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{\frac{1}{2}} \quad 32.43)$$

V_i : Le volume atomique de diffusion (voir le tableau 3.6)

Atomic and Structural Diffusion Volume Increments			
C	16.5	(Cl) 19.5	
H	1.98	(S) 17.0	
O	5.48	Aromatic pr heterocyclic rings	-20.2
(N) ^a	5.69		
Diffusion Volumes of Simple molecules			
H ₂	7.07	CO ₂	26.9
D ₂	6.70	N ₂ O ₂	35.9
He	2.88	NH ₃	14.9
N ₂	17.9	H ₂ O	12.7
O ₂	16.6	(CCl ₂ F ₂)	114.8
Air	20.1	(SF ₆)	69.7
Ar	16.1	(Cl ₂)	37.7
Kr	22.8	(Br ₂)	67.2
Ne	5.59	(SO ₂)	41.1
(Xe)	37.9	CO	18.9

Tableau 3-7 Le volume de diffusion pour quelques atomes et molécules.[20].

^aparenthèses indique que la valeur est basée seulement sur un petit nombre des points data

	Température(K)	Coefficient de diffusion 10 ⁻⁵ (m ² /s)
D _{O₂/O₂}	298.15	2.0752
D _{N₂/N₂}	298.15	2.1092
D _{C₃H₈/C₃H₈}	298.15	0.7091
D _{O₂/N₂}	298.15	2.0941
D _{O₂/C₃H₈}	298.15	1.1593
D _{N₂/C₃H₈}	298.15	1.1827

Tableau 3-8 Le coefficient de diffusion binaire.

Pour calculer le coefficient de diffusion dans les systèmes multi-composants, Wilke a utilisé l'équation de Maxwell-Stefan pour d'écrire l'expression suivante [17].

$$D_m = \sum_{i=1}^n D_{g i} \quad (3.44)$$

$D_{g i}$: Coefficient de diffusion globale de l'élément i constituant le mélange.

$$D_{g i} = \left(\sum_{j=1}^{n-1} \frac{y_j}{D_{i/j}} + \frac{1 - \sum_{j=1}^{n-1} y_j}{D_{i/n}} \right)^{-1}$$

Pour notre problème :

Tableau 3-9 les coefficients de diffusion de chaque espèce.

$D_{O_2/C_3H_8} = 1.1593 \cdot 10^{-5} (m^2/s)$	$D_{gO_2} = 1.2718 \cdot 10^{-5}$
	$D_{gC_3H_8} = 7.6931 \cdot 10^{-6}$

Ce chapitre a présenté une approche numérique pour résoudre le problème de diffusion, en s'appuyant sur les équations de Fick et les lois de la thermodynamique. Le choix d'un schéma explicite en une dimension a permis d'optimiser les ressources de calcul. Les conditions aux limites du tube ont été imposées à l'aide d'une méthode de différences finies, permettant ainsi de déterminer les valeurs de la variable étudiée aux points situés en dehors du domaine physique.

Le critère de stabilité de Von Neumann aide à bien choisir les pas dx , dy et dt pour garantir la convergence de schéma numérique qui conditionnellement stable.

Dans la deuxième partie, nous procéderons à un examen critique des différentes formulations théoriques et empiriques du coefficient de diffusion, en soulignant les hypothèses sous-jacentes à chaque modèle et en discutant de leur applicabilité à divers systèmes.

Une étude numérique a été faite sur la diffusion d'espèces gazeuses dans un tube vertical. Dans un premier temps, nous avons pu constater que les temps de diffusion obtenus par la loi de Fick et le logiciel ANSYS compatibles.

Le deuxième objectif du projet était d'appréhender l'influence de la gravité et de la température sur ce phénomène. Nous pensions que la force de gravité ralentirait l'homogénéisation du mélange mais les résultats obtenus contredisent cette hypothèse.

CHAPITE 4 MODELISATION DE LA COMBUSTION PAR TRANCHE

4 Modélisation de la combustion par tranche

4.1.1 Introduction

La combustion est une réaction chimique de deux réactifs qui se déroule dans des zones localisées, appelées flammes. La flamme se caractérise par l'apparition de gradients de température et de pression, ainsi que par la variation des concentrations des produits et des réactifs. Le processus de diffusion est l'un des principaux phénomènes physiques complexes fortement couplés, permettant la description de la combustion par tranche.

4.1.2 Modélisation Combustion par tranches

La modélisation des phénomènes est de plus en plus utilisée dans l'industrie car avec les calculateurs actuels, elle est plus économique et plus rapide que les essais expérimentaux.

La combustion par tranche est utilisée comme outil d'analyse des signaux de pression expérimentaux. Il permet de mettre en avant par une approche les différents phénomènes impliqués dans la propagation de la flamme.

Généralités et hypothèses :

Le modèle de combustion par tranches considère la propagation de la flamme dans une enceinte fermée comme une succession d'états d'équilibre thermodynamique locaux. Chaque tranche, lorsqu'elle est atteinte par le front de flamme, subit une augmentation de pression due à l'expansion des produits de combustion. La compression progressive provoque, dans les gaz brûlés, une élévation de température qui peut atteindre plusieurs centaines de degrés en fin de combustion à volume constant.

La compression des gaz, tant frais que brûlés, induit des variations de température et de pression significatives. En particulier, la combustion à volume constant entraîne une augmentation drastique de la température des gaz brûlés. Pour modéliser ces phénomènes complexes, nous avons établi un modèle thermodynamique basé sur un certain nombre d'hypothèses simplificatrices concernant les propriétés des gaz.

✚ Les gaz frais et les gaz brûlés se comportent comme des gaz parfaits

✚ Les chaleurs spécifiques C_p et C_v à des gaz frais sont considérées comme constante

✚ La combustion s'effectue à volume constant

- ✚ Le mélange gazeux est divisé en N tranches ayant la même masse
- ✚ A tout moment et en particulier pendant la combustion la pression est uniforme.
- On considère qu'il n'y a pas de gaz résiduels

4.1.3 Mécanisme de combustion par tranches

4.1.4 Calcul des paramètres thermodynamiques

lorsque la tranche I vient de brûler

- ❖ Etat initial.

	J < I	I	J > I+1
Gaz brûlé	i	Gaz frais	
P(i)		P(i)	
T _b (i)		T _t (i)	
V _b (i)	V _t	V' _f (i)	

Figure 4.1 Mécanisme de combustion par tranches.

- Les indices I et J caractérisent respectivement la tranche I qui brûle et la tranche J considérée.
- J < I caractérise les gaz brûlés alors que J > I+1 fait référence aux gaz frais

Soit :

Volume total V(i)

$$V_f(i) = V_t + V'_f(i)$$

V_t : volume de la tranche i

V_f(i) : volume total des gaz frais avant la combustion de la tranche i

V'_f(i) : volume des gaz non brûlés.

Combustion de la tranche i

❖ Dilatation fictive de la tranche i

J < I	I	J > I+1
Gaz brulé	Brulé	Gaz frais
P(i)	P(i)	P(i)
T _b (i)	T _{1b} (i)	T _f (i)
V _b (i)	V _{1b} (i)	V _f (i)

Figure 4.2 Mécanisme de délimitation de combustion par tranches.

Volume total

$$V(i) + (V_{1b} - V_i)$$

- ✓ $X(I,J) = V(I,J) / V_t$ est la fraction volumique où $V(I,J)$ est le volume de la tranche J lorsque I vient de brûler et V_t est la volume total de la chambre.
- ✓ $T(I,J)$ est la température de la tranche J lorsque la tranche I vient de brûler
- ✓ $P(I)$ est la pression dans la chambre à l'instant où I vient de brûler

Cette phase est suivit par :

❖ Homogénéisation

Puis par

❖ Recompression adiabatique

On suppose d'abord que la I^{ème} tranche brûle adiabatiquement et à pression constante c'est à dire à P(I-1). Ceci implique une augmentation de volume dans le reste de la chambre. Ensuite, nous cherchons les conditions pour lesquelles l'équilibre des pressions est réalisé dans toute la chambre de combustion Figure (4.3),

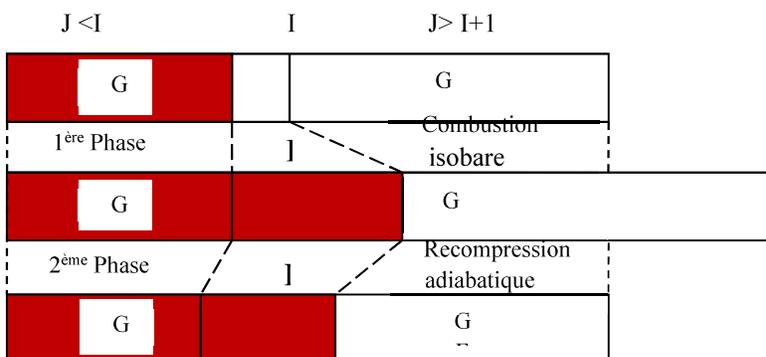


Figure 4.3 Mécanisme des tranches.

Combustion adiabatique à pression constante

Un calcul de la température de combustion à P(I-1) permet d'aboutir à la valeur :

$$T(I,I) = (T_{fi} - T_0) + T(I-1,I)$$

T_{fi} est la température de flamme à pression constante

En utilisant l'équation d'état des gaz parfaits où N_b / N_f est le rapport des nombres de moles de gaz frais sur celui des gaz brûlés, on trouve la fraction volumique de la tranche I suite à la combustion isobare :

$$X'(I,I) = X(I-1,I) \frac{T(I,J)}{T(I-1,J)} \cdot \frac{N_b}{N_f}$$

Compression adiabatique jusqu'à l'équilibre des pressions

Compte tenu de la compression adiabatique des gaz frais et si les coefficients isentropiques des gaz frais γ_f et brûlés γ_b sont constants, on peut écrire les systèmes suivants

Pour les tranches de gaz brûlés c'est à dire pour $J < I$

$$X(I,J).P(I)^{\frac{1}{\gamma_b}} = X(I-1,J).P(I-1)^{\frac{1}{\gamma_b}}$$

Pour la tranche qui vient de brûler, c'est à dire $J = I$

$$X(I,J).P(I)^{\frac{1}{\gamma_b}} = X'(I,J).P(I-1)^{\frac{1}{\gamma_b}}$$

Pour les tranches de gaz frais, c'est à dire pour $J > I+1$

$$X(I,J).P(I)^{\frac{1}{\gamma_f}} = X(I-1,J).P(I-1)^{\frac{1}{\gamma_f}}$$

avec γ_f et γ_b sont respectivement les coefficients de compression adiabatique des gaz frais et des gaz brûlés.

Sachant que le volume est constant :

$$\sum_{j=1}^N X(I,J) = 1$$

On obtient finalement une expression permettant de déduire P(I) de P(I-1) :

$$\sum_{j=1}^{I-1} \left(\frac{P(I-1)}{P(I)} \right)^{\frac{1}{\gamma_b}} \left(\sum_{j=1}^{I-1} X(I-1, J) + X'(I, I) \right) + \sum_{j=I+1}^N \left(\frac{P(I-1)}{P(I)} \right)^{\frac{1}{\gamma_f}} X(I-1, J) = 1$$

Dans cette expression $\frac{P(I-1)}{P(I)}$ est l'inconnue que l'on peut calculer par itération au moyen de la méthode de Newton par exemple.

Si on pose

$$A = X'(I, I) + \sum_{J=1}^{I-1} X(I-1, J)$$

$$B = \sum_{J=I+1}^N X(I-1, J)$$

$$Y = \frac{P(I-1)}{P(I)}$$

La relation s'écrit alors :

$$Y^{1/\gamma_b} \cdot A + Y^{1/\gamma_f} \cdot B = 1$$

En posant :

$$F(Y) = Y^{1/\gamma_b} \cdot A + Y^{1/\gamma_f} \cdot B - 1$$

La formule de Newton s'écrit :

$$Y_{i+1} = Y_i - \frac{F(Y)}{F'(Y)}$$

Pour laquelle l'erreur est :

$$\Delta Y = \frac{1}{2} \frac{F''(Y)}{F'(Y)} (Y_{i+1} - Y_i)^2$$

Connaissant P(I), on peut déterminer les températures T(I,J) et les fractions volumiques X(I,J) dans les différentes tranches de gaz lorsque la tranche I vient de brûler

Pour les tranches de gaz brûlés, c'est à dire $J \leq I$

$$X(I, J) = X(I-1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I-1)} \right)^{-1/\gamma_b} = X(I-1, J) \cdot Y^{+1/\gamma_b} \quad [A]$$

$$T(I, J) = T(I-1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I-1)} \right)^{(\gamma_b-1)/\gamma_b} = T(I-1, J) \cdot Y^{(\gamma_b-1)/\gamma_b} \quad [B]$$

Pour les tranches de gaz frais, c'est à dire $J > I$

$$X(I, J) = X(I - 1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I - 1)} \right)^{-1/\gamma_f} = X(I - 1, J) \cdot Y^{+1/\gamma_f} \quad [C]$$

$$T(I, J) = T(I - 1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I - 1)} \right)^{(\gamma_f - 1)/\gamma_f} = T(I - 1, J) \cdot Y^{(\gamma_f - 1)/\gamma_f} \quad [D]$$

pour la tranche I de masse ΔM :

$$\Delta M = \rho_f(I-1) \cdot A_f \cdot \text{Su} \cdot \Delta t \quad [E]$$

où

$\rho_f(I-1)$ est la masse volumique de la tranche I avant sa combustion = $\rho_0 \cdot \left(\frac{P}{P_0} \right)^{1/\gamma_f}$

ρ_0 est la masse volumique initiale du prémélange

Δt est le temps nécessaire pour brûler la tranche I

A_f est la surface de la flamme.

Su peut varier au cours de la combustion par exemple sous l'effet de l'augmentation de température ou alors de la richesse locale mais est connue dès lors que les caractéristiques locales du milieu sont connues. Af en revanche peut être différente de la section du tube.

CHAPITE 5. RESULTATS ET INTERPRETATIONS

5 Résultats et interprétations

Les résultats de cette étude sont présentés en deux volets. Le premier volet concerne les résultats expérimentaux, tandis que le second volet est consacré à l'interprétation des résultats numériques, avec une attention particulière portée à la visualisation des champs physiques et à la comparaison avec les données expérimentales

5.1 Convergence

A la convergence, toutes les équations de conservation discrétisées (quantité de mouvement, énergie...etc.), se conforment dans chaque cellule à une tolérance spécifiée, et la solution ne change plus avec le temps Figure (5.1).

Le suivi de la convergence est réalisé en analysant l'évolution des résidus. En général, une décroissance d'un ordre 10^{-3} en magnitude des résidus indique une convergence au moins qualitative et les caractéristiques principales de l'écoulement sont établies.

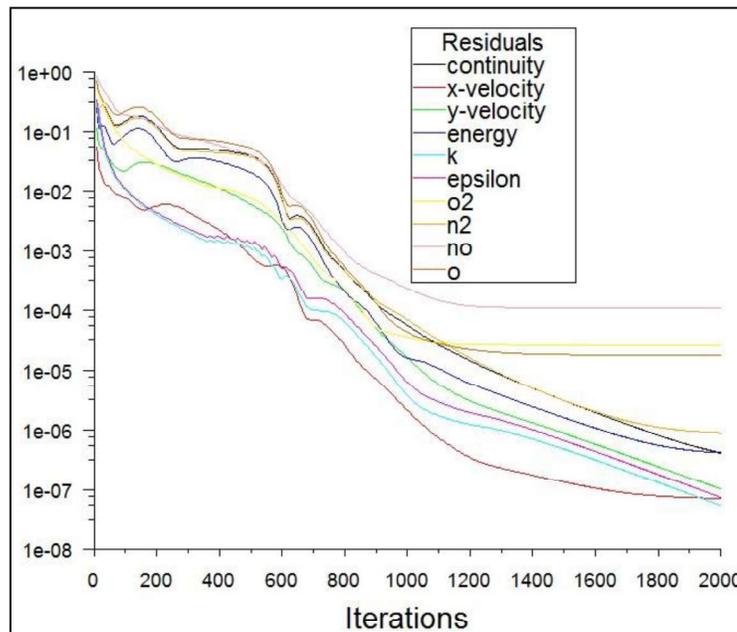


Figure 5.1 Les résidus.

5.2 Validation des résultats

Cette section sera consacrée à une analyse comparative entre les résultats expérimentaux et les données numériques obtenues par simulation du phénomène de diffusion.

5.2.1 Répartition des espèces au cours de temps

On part généralement du principe, parfois implicitement, que le mélange de gaz explosif est uniforme et homogène. Cependant, en pratique, le mélange résulte souvent d'un rejet accidentel d'une substance chimique dans l'air, ce qui conduit à un mélange de gaz non uniforme et, par conséquent, à des gradients de concentration de pression ou de température. Ces gradients correspondent à des distributions du degré de réactivité et, par conséquent, à une capacité plus ou moins grande à réagir. De plus, ils influencent les conséquences de l'explosion. Cette étude vise à étudier le comportement de ces gradients dans le cas d'explosions en milieu réactif, non uniforme et confiné. Les phénomènes de diffusion, de combustion et de propagation de flamme de mélanges hétérogènes à l'intérieur de chambres fermées sont étudiés par le biais de simulations numériques. De plus, une étude comparative avec des travaux précédemment publiés est développée et présentée pour valider nos résultats. Pour cette expérience, nous avons procédé à un remplissage différentiel du tube. La partie supérieure a été saturée en propane (100% C_3H_8) tandis que la partie inférieure a été remplie d'oxygène pur (100% O_2).

5.3 Résultats

Une simulation numérique de l'influence de l'hétérogénéité sur la propagation de la flamme est réalisée après vérification de la compatibilité de l'évolution des concentrations dans le domaine spatio-temporel de nos résultats de simulation numérique avec les résultats expérimentaux en tenant compte de différentes compositions de mélanges. Cette simulation a permis d'identifier les paramètres (pression, vitesse) qui augmentent ou diminuent le risque de transition de la déflagration à la détonation. L'analyse de ces résultats permet de suivre l'évolution des concentrations des différentes espèces étudiées au cours du temps, en fonction de différents délais initiaux un délai variable.

De plus, une représentation de la vitesse est réalisée pour mettre en évidence le comportement du mélange pendant la diffusion. Pour mieux comprendre ce phénomène et prédire son comportement, il est nécessaire de recourir à des simulations numériques.

Méthodologie de la simulation : La première étape de la simulation a consisté à valider la capacité du modèle numérique à reproduire correctement l'évolution des concentrations dans le temps et l'espace, en comparant les résultats de la simulation à des données expérimentales obtenues pour différentes compositions de mélanges. Cette étape d'étalonnage assure la fiabilité des résultats

ultérieurs. La simulation a ensuite été utilisée pour étudier l'influence de deux paramètres clés sur le risque de transition de la déflagration à la détonation la pression et la vitesse de propagation. La transition est un phénomène dangereux où la flamme passe d'un régime subsonique de déflagration à un régime supersonique de détonation, libérant brusquement une grande quantité d'énergie. Identifier les conditions qui favorisent ou empêchent la transition est crucial pour la sécurité.

5.3.1 Résultats de la simulation :

La simulation a permis d'identifier les valeurs de pression et de vitesse de propagation qui augmentent ou diminuent le risque de transition. Ces résultats sont essentiels pour développer des modèles prédictifs et des stratégies de contrôle visant à éviter ce phénomène indésirable.

Analyse des résultats :

Une représentation de l'évolution de la concentration des différentes espèces chimiques présentes dans le mélange est présentée pour différents délais. Cette analyse permet de comprendre les mécanismes physico-chimiques qui sous-tendent la propagation de la flamme et l'influence de l'hétérogénéité sur ces mécanismes. De plus, une visualisation de la vitesse du mélange est fournie. Cette représentation permet d'observer le comportement du mélange pendant la diffusion et de voir comment les gradients de concentration affectent le mouvement de la flamme.

5.3.2 Compatibilité des temps de diffusion avec la loi de Fick

Les simulations numériques ont été réalisées en considérant un système initialement hors équilibre thermodynamique, caractérisé par une hétérogénéité de composition dans un tube vertical. L'évolution temporelle du profil de concentration en dioxygène a permis de valider quantitativement l'applicabilité de la loi de Fick dans ce contexte

La loi de Fick décrit la diffusion, un processus par lequel les molécules se déplacent d'une zone de concentration élevée vers une zone de concentration faible.

- En comparant l'évolution du pourcentage d'oxygène dans la simulation avec les prédictions de la loi de Fick, on peut vérifier si le modèle de diffusion utilisé dans la simulation est réaliste.
- Le fait que la valve soit ouverte permet aux molécules de méthane et d'oxygène de se mélanger librement entre les deux sections du tube.
- La concordance entre les résultats expérimentaux (évolution du % d'O₂) et les prédictions de la loi de Fick constitue une validation de notre modèle de simulation numérique.

- L'évolution du pourcentage d'oxygène dans le tube nous permet de vérifier la fiabilité de notre modèle numérique en le confrontant à une loi physique bien établie (loi de Fick).

La comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux présentés dans la référence [5] pour le cas du mélange méthane/air à une abscisse axiale fixe, ces résultats ont été comparés à différents moments pendant le processus de mélange montre une différence négligeable. Les résultats numériques sont obtenus en résolvant la loi de Fick. Le fait que la différence entre les résultats numériques et expérimentaux soit négligeable signifie que les deux méthodes fournissent des résultats très similaires et concordants tableau (5.2) . L'utilisation de la loi de Fick pour les calculs numériques indique que le modèle de diffusion utilisé est basé sur cette loi fondamentale de la physique. En effet, contrairement à la simulation numérique qui peut calculer directement la concentration en oxygène à partir de la loi de Fick, les expériences pratiques nécessitent un instrument de mesure pour déterminer cette valeur. Un opacimètre est un appareil couramment utilisé à cet effet. La diminution initiale de concentration observée avec la loi de Fick correspond à deux phénomènes simultanés :

1. L'oxygène présent dans le tube diffuse dans la cellule de l'oxymètre, provoquant une diminution de la concentration d'oxygène dans la cellule.
2. La concentration d'oxygène dans la cellule diminue pour atteindre la concentration réelle d'oxygène dans le tube. Ce processus d'équilibrage se produit jusqu'à ce que les concentrations soient uniformes.

Comparaison avec les résultats expérimentaux :

Le tableau (5.3) présente des données qui permettent de comparer les résultats expérimentaux obtenus par [5] avec nos calculs. On observe un bon accord qualitatif entre les deux ensembles de données en ce qui concerne la diffusion des espèces. De plus, le calcul de l'erreur relative maximale ($E=1,58\%$) pour la quantité mesurée montre que notre équation est remarquablement vérifiée.

En d'autres termes, la comparaison avec les travaux antérieures[5] montre que notre modèle et nos calculs reproduisent bien le comportement qualitatif de la diffusion des espèces observé dans les expériences. De plus, l'erreur relative calculée est très faible, ce qui indique que vos résultats quantitatifs sont également en bon accord avec les données expérimentales.

Tableau 5-1 Vitesse moléculaire moyenne et coefficient de diffusion.

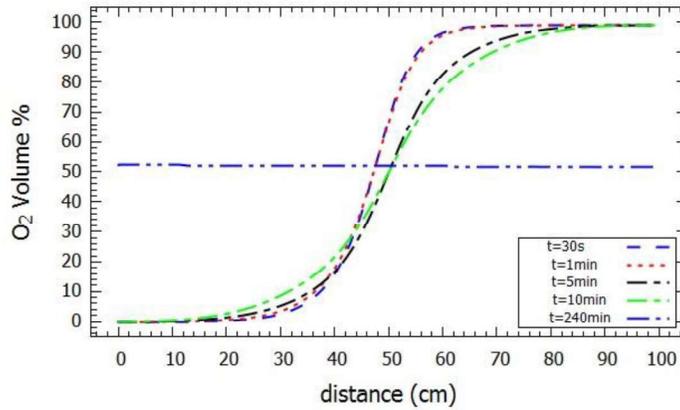
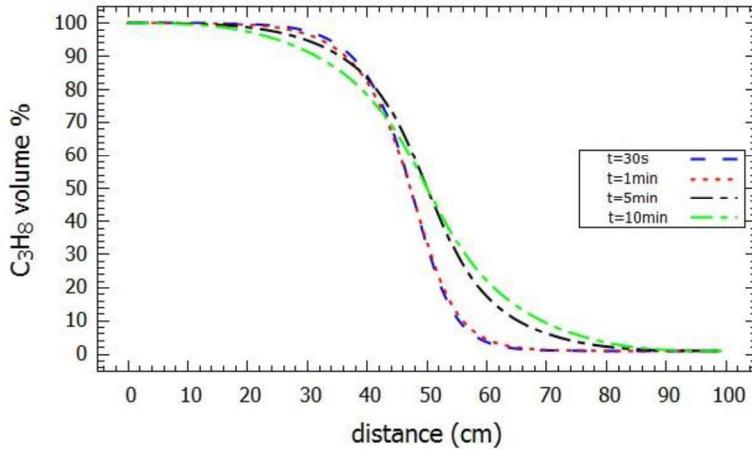
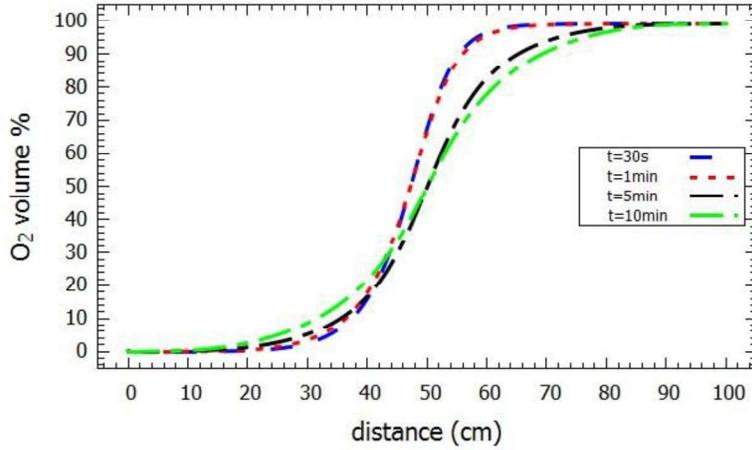
Time	O ₂	O ₂ Exp	Time	O _{2k}	O ₂ Exp
0	0,1700	0,1760	12000	0,17561	0,17349
600	0,16843	0,1728	12600	0,17604	0,1740
1800	0,16848	0,16973	13800	0,17685	0,17467
2400	0,1686	0,1692	14400	0,17723	0,17493
3000	0,16881	0,16893	15000	0,17761	0,17547
3600	0,16911	0,16893	15600	0,17797	0,17573
4200	0,16948	0,16893	16200	0,17832	0,1760
4800	0,16991	0,1692	16800	0,17866	0,17627
5400	0,17036	0,16947	17400	0,17899	0,17634
6000	0,17086	0,16979	18000	0,17932	0,17653
6600	0,17134	0,17026	18600	0,17965	0,17741
7200	0,17184	0,17067	19200	0,17991	0,17748
7800	0,17233	0,1708	19800	0,1802	0,17821
8400	0,17283	0,1712	20400	0,18075	0,1784
9600	0,1738	0,172	21600	0,18127	0,1788
10200	0,17427	0,17227	22200	0,18151	0,17906
10800	0,17423	0,1728	22800	0,18175	0,17918
11400	0,175	0,173	23400	0,1819	0,1797

5.3.3 Influence de la densité sur la diffusion :

- Afin d'étudier l'influence de la densité sur la diffusion, l'étude vise à comprendre comment la densité d'un mélange affecte la vitesse à laquelle ses composants se mélangent les uns aux autres et nous avons examiné les mélanges listés dans le tableau (3.4) . Une série de simulations portant sur les proportions propane-oxygène pour la combustion dans un volume confiné a été réalisée, et les principaux résultats des simulations seront développés dans la section suivante.
- La distribution d'oxygène (O₂) est une fonction de la distance le long de l'axe central du tube à section carrée (distance $x=0$ m en bas et $x=1$ m en haut du tube) et du temps de diffusion. Ces résultats permettent d'identifier l'impact de la densité sur la diffusion. À différents moments (30 sec, 1 min, 5 min, 10 min), nous avons tracé la diffusion moléculaire et cherché à connaître l'influence de la densité des mélanges sur la diffusion et les intervalles de temps de diffusion critiques. À cette fin, nous avons modélisé deux cas différents :

Cas 1 : La partie inférieure du tube est remplie de propane (C₃H₈), tandis que la partie supérieure est remplie d'oxygène (O₂). Cela signifie que l'espèce la plus dense se trouve au fond du tube.

Des mesures ont été effectuées à différents moments. La tableau (5.2) [(a), (b) et (c)] montre la distribution des deux mélanges le long du tube pour différentes durées de diffusion dans ce cas. On peut remarquer que le temps de diffusion est égal à 240 min.



Le fait que le temps de diffusion soit de 240 minutes indique que le processus de diffusion est relativement lent dans ce cas, en raison de la densité plus élevée du propane au fond du tube. La tableau (5.5) montre que la concentration d'oxygène augmente progressivement le long du tube en fonction du temps de diffusion. Au fil du temps, les molécules de propane et d'oxygène se diffusent progressivement l'une vers l'autre en raison du mouvement thermique aléatoire. On observe que l'oxygène diffuse progressivement vers le haut du tube au cours du temps, remplaçant le propane.

La vitesse de diffusion est plus lente au début et s'accélère ensuite en raison de la différence de densité entre les deux gaz, on observe également que la zone de mélange entre les deux gaz s'élargit avec le temps.

Cas 2 : La partie inférieure du tube est remplie d'oxygène (O_2) tandis que la partie supérieure est remplie de propane (C_3H_8). Cela signifie que l'espèce la plus dense se trouve en haut du tube (M1 100% C_3H_8 , M2 100% O_2). La Figure (5.6) [(a), (b))] montre la distribution des deux mélanges le long du tube pour différents temps de diffusion.

Dans ce cas, on peut remarquer que le temps de diffusion est égal à 210 min, donc si on augmente le temps de simulation à 230 min et 260 min, on observe que les courbes obtenues sont des valeurs constantes avec le même niveau obtenu à 210 min. En comparant avec les résultats obtenus du cas 1 (M1 : 100% O_2 , M2 : 100% C_3H_8), où le temps de diffusion était de 240 min Figure(4.3c), il faut noter que le temps de diffusion devient plus faible.

Le temps de diffusion est le temps nécessaire pour que les deux gaz se mélangent complètement.

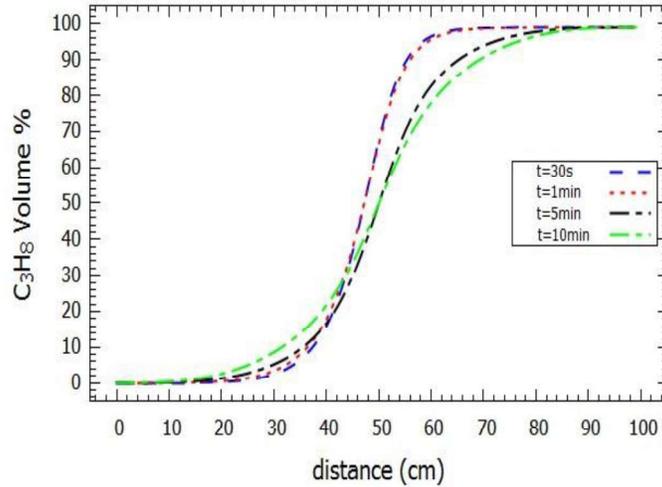


Figure 5.5 (a) Diffusion de propane C3H8

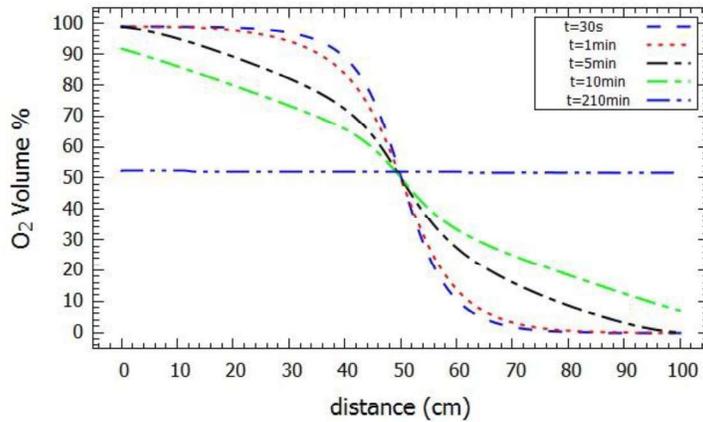


FIGURE 5.6 (B) DIFFUSION DE PROPANE O2

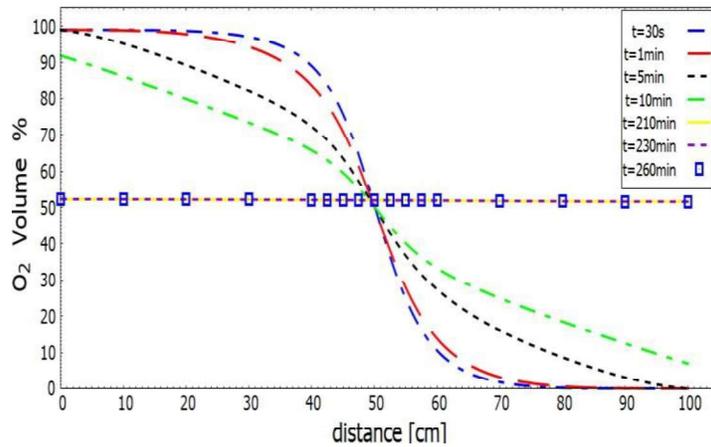


FIGURE 5.7 (c) DIFFUSION DE O2, C3H8 2 EME CAS.

Les différents résultats obtenus montrent que la diffusion moléculaire est un phénomène lent. La Figure (4.3 c) indique que le taux de diffusion est important dans les zones où le gradient de concentration est plus important, même s'il est faible. Il est important de souligner que ces différentes simulations visent à modéliser la combustion par tranche d'un mélange non-homogène.

Pour tous les cas traités avec les deux configurations, les résultats obtenus montrent que le temps d'homogénéisation est essentiel. Il permet d'analyser le phénomène de diffusion des espèces chimiques, en particulier celles qui forment un mélange explosif. De plus, l'analyse montre que l'ouverture du clapet entraîne une homogénéisation rapide du mélange gazeux dans le tube. Cette évolution temporelle des concentrations en propane et en oxygène est en accord avec les modèles de diffusion des gaz et permet de prédire les conditions propices l'analyse permet de prédire le risque de combustion et la transition déflagration-détonation Figure (4.3).

5.3.4 Influence de la gravité:

Pour étudier l'influence de la gravité sur le phénomène de diffusion, les valeurs de fraction massique pour un même élément sont inversées. Ce choix est justifié par le mouvement brownien qui caractérise la diffusion et la difficulté de prédire le comportement des éléments gazeux impliqués. En d'autres termes, pour analyser l'impact de la gravité, on inverse la position des éléments dans le mélange : ce qui était en haut est mis en bas, et vice versa. Cette méthode est choisie car le mouvement brownien (mouvement aléatoire des particules) est le principal moteur de la diffusion. Il est difficile de prédire précisément le comportement individuel des éléments gazeux, d'où la justification de cette simplification.

Dans cette situation, la Figure (5.4) montre que l'influence de la gravité est faible, voire négligeable. Cette observation peut être expliquée par d'autres phénomènes (interactions intermoléculaires) qui surpassent la force de gravité, laquelle devrait logiquement accélérer la diffusion.

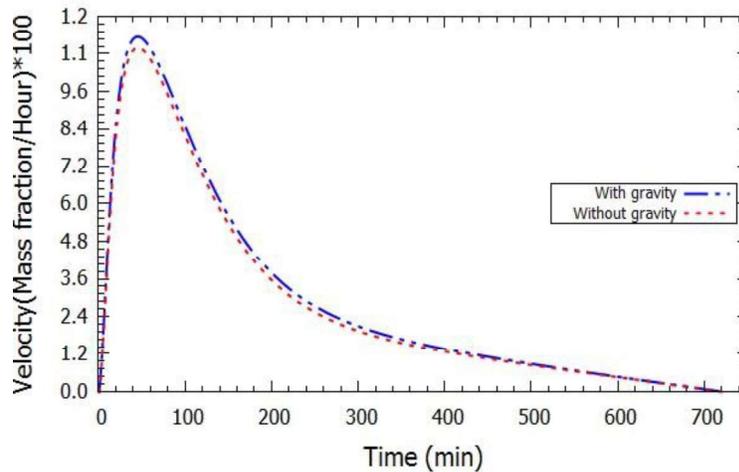


Figure 5.8 Influence de la gravité

L'analyse de la Figure(5.8) révèle que les forces gravitationnelles ont une influence très faible, voire nulle, sur le phénomène observé. Ce résultat s'explique par la prédominance des interactions entre les molécules, qui sont responsables de l'accélération de la diffusion.

Les résultats expérimentaux présentés dans les Figures (5.8 et 5.9) montrent sans équivoque que l'augmentation du nombre d'éléments entraîne une diminution substantielle de la vitesse de diffusion. Cette observation suggère que les interactions interatomiques, qui se multiplient avec l'augmentation de la complexité du système, jouent un rôle prépondérant en limitant la mobilité des atomes et en ralentissant ainsi le processus de diffusion

5.3.5 Influence de la température :

On constate que la diffusion est essentiellement due à un fort gradient de concentration et à l'agitation thermique. Même si l'influence de la température n'apparaît pas explicitement dans l'équation de Fick, elle est introduite dans le coefficient de diffusion. La Figure (5.8), qui représente l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la température, montre une variation exponentielle de ce paramètre.

On peut donc comprendre que la relative faiblesse de l'influence de la gravité observée sur les Figures précédentes s'explique par le rôle dominant de l'agitation thermique et du gradient de concentration dans le processus de diffusion.

On constate que la diffusion est essentiellement due à un fort gradient de concentration et à l'agitation thermique. Même si l'influence de la température n'apparaît pas explicitement dans l'équation de Fick, elle est introduite dans le coefficient de diffusion. La Figure (5.9), qui représente l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la température, montre une variation exponentielle de ce paramètre.

On peut donc comprendre que la relative faiblesse de l'influence de la gravité observée sur les Figures précédentes s'explique par le rôle dominant de l'agitation thermique et du gradient de concentration dans le processus de diffusion.

L'équation (4), issue de la résolution de l'équation de Boltzmann, a été développée indépendamment par Chapman et Enskog [17] et a permis d'évaluer l'effet de la température sur le coefficient de diffusion en tant que grandeur activée thermiquement. En effet, tous les calculs sont effectués sur la base de la théorie atomique de la diffusion. Selon la loi d'Arrhenius, l'augmentation de la température implique l'augmentation du coefficient de diffusion, ce qui signifie l'accélération du phénomène de diffusion due à l'agitation thermique.

L'existence d'un gradient de concentration et l'agitation thermique sont les deux moteurs de la diffusion. Si l'équation de Fick ne met pas en évidence l'influence de la température, cette dernière est prise en compte dans le coefficient de diffusion. La relation de Chapman-Enskog, fruit de la théorie cinétique des gaz, permet d'évaluer quantitativement cette influence en fonction des propriétés du milieu et de la température.

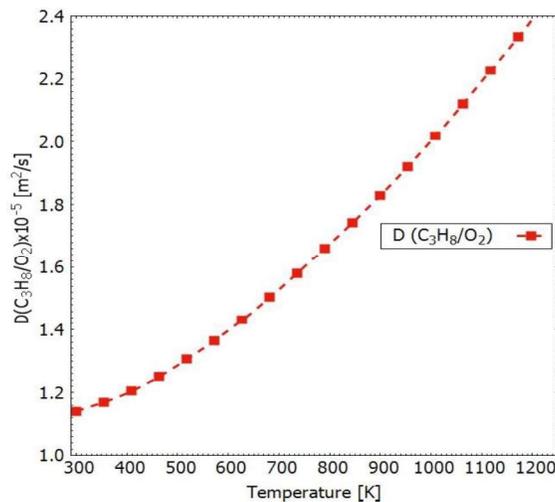


Figure 5.9 Evolution de coefficient de diffusion

La courbe de la Figure (5.9) représente la relation entre la température et le coefficient de diffusion, montre une augmentation exponentielle du coefficient avec la température qui influe directement sur la modélisation des flammes de prémélangées qui présente plusieurs défis. Tout d'abord, il est nécessaire de représenter correctement les caractéristiques de la combustion. Cela implique de modéliser le phénomène de diffusion moléculaire, les réactions chimiques, la formation et la propagation des flammes, ainsi que les phénomènes de mélange hétérogène.

Des modèles de combustion, tels que le modèle de combustion par tranche ou les modèles de prémélange partiel, sont souvent utilisés pour capturer les caractéristiques clés de la flamme, telles que la distribution des espèces chimiques, le signal de pression, la forme de la flamme, la vitesse de propagation, les températures et les profils de composition. Ces objectifs sont importants pour évaluer les performances des systèmes de combustion et contribuent à une meilleure compréhension des processus de combustion et à des avancées dans l'optimisation des systèmes de combustion. L'utilisation du propane (C_3H_8) soulève de nombreuses questions, notamment en ce qui concerne les problèmes liés à sa sécurité lors du transport ou du stockage. De ce point de vue, le processus physique de combustion du propane (C_3H_8) dans un environnement confiné doit être contrôlé afin que les résultats obtenus (température, pression) ne dépassent pas les limites fixées par des considérations technologiques.

En d'autres termes, on s'inquiète de la sécurité du propane pendant son transport et son stockage. Pour garantir cette sécurité, il est crucial de maîtriser le processus de combustion du propane dans des espaces confinés. Cela signifie que la température et la pression générées par la combustion doivent rester dans des limites acceptables pour éviter tout risque d'accident. On utilise la même chambre de combustion que pour l'étude de la diffusion afin de comprendre comment la flamme se propage à l'intérieur. On s'intéresse notamment à la vitesse de propagation, ainsi qu'à la pression totale générée par la combustion, car c'est cet effet qui a le plus d'impact sur le fonctionnement du système.

En effet, l'amélioration du mélange dans un processus de combustion présente de nombreux avantages :

- Réduction de l'instabilité de la combustion: Un mélange homogène et bien contrôlé brûle plus proprement et de manière plus stable, évitant les fluctuations de pression et de température qui peuvent nuire au rendement et à la sécurité du système.
- Diminution des émissions de polluants: Un mélange optimal assure une combustion plus complète du carburant, ce qui réduit la formation de polluants tels que le monoxyde de carbone (CO) et les hydrocarbures imbrûlés (HC).
- Amélioration du rendement: Une combustion plus efficace permet d'extraire plus d'énergie du carburant, entraînant une augmentation de la puissance et du rendement énergétique global du système.

En résumé, l'optimisation du mélange dans la combustion est un enjeu crucial pour améliorer la performance, la stabilité et la propreté des systèmes de combustion, qu'il s'agisse de moteurs à combustion interne, de centrales électriques ou d'autres applications industrielles.

La simulation numérique a permis de déterminer la température adiabatique de flamme, incluant les effets radiatifs, à 2100 K. Les profils de température et de pression obtenus mettent en évidence un gradient thermique positif le long de l'axe du tube, conséquence directe de la nature exothermique des réactions de combustion et de l'absence de pertes thermiques par convection aux parois Figure (5.11),.

On observe une augmentation significative de la température en fonction de la distance. Cela s'explique principalement par la nature du mélange de gaz et par le fait que les parois sont adiabatiques, c'est-à-dire qu'elles n'échangent pas de chaleur avec le milieu extérieur.

En revanche, la pression augmente du bas vers le milieu du tube puis diminue dans sa partie supérieure Figure(5.10). Ce phénomène dépend de plusieurs facteurs, notamment de la diminution de la concentration du mélange et de la géométrie du milieu confiné. La combustion du propane est une réaction exothermique, ce qui signifie qu'elle libère de la chaleur. Comme les parois du tube sont adiabatiques, cette chaleur ne peut pas être dissipée vers l'extérieur et s'accumule donc dans le mélange gazeux, entraînant une augmentation de la température. En outre La pression est influencée par plusieurs facteurs, notamment la température, la concentration du mélange gazeux et la géométrie du tube. Dans ce cas, l'augmentation de la température contribue à une augmentation de la pression. Cependant, la diminution de la concentration du mélange gazeux vers le haut du tube (en raison de la combustion progressive) contrebalance partiellement cette augmentation, ce qui explique la diminution de la pression dans la partie supérieure du tube.

La géométrie du tube joue également un rôle important. En effet, la section transversale du tube peut influencer le mouvement des gaz et la répartition de la température et de la pression.

En résumé, les observations de la simulation numérique s'expliquent par l'interaction de plusieurs facteurs liés à la nature de la combustion du propane, aux propriétés du tube et aux conditions initiales du mélange gazeux.

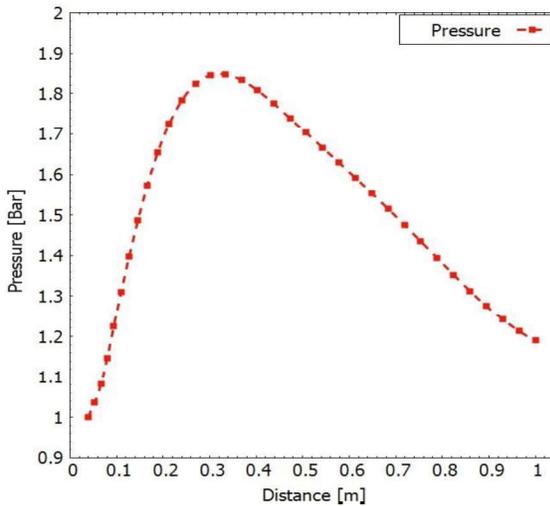


Figure 5.10 Evolution de la pression de combustion

Les mesures expérimentales initiées par [5] nous ont permis d'obtenir la Figure (9), qui présente l'évolution de la propagation de la flamme dans notre tube. Nous avons collecté une base de données de 1500 images prises à des intervalles de temps de 1 ms. Sur la Figure (9), on observe qu'initialement la flamme est située dans la partie inférieure du tube puis se propage vers le haut jusqu'à la distance de 1 m. Grâce à ces mesures, nous pouvons estimer l'évolution de la vitesse de propagation de la flamme en fonction de la distance par rapport au bas du tube, ce qui est illustré dans la Figure (5.9), où nous comparons les résultats expérimentaux avec ceux obtenus par simulation numérique.

La Figure (5.12) compare les vitesses de flamme obtenues par nos simulations à celles obtenues expérimentalement à partir des enregistrements vidéo. Dans les deux cas, les résultats montrent que la combustion se produit dans l'axe du tube et que sa vitesse augmente initialement puis diminue avec la distance par rapport au bas. Il semble que les vitesses de flamme prédites numériquement soient légèrement surestimées, ce qui s'explique principalement par le fait que nous n'avons pas pris en compte les pertes de chaleur à travers les parois, celles-ci étant considérées comme adiabatiques. Toutefois, il est à noter que même les résultats expérimentaux peuvent souffrir d'un manque de précision.

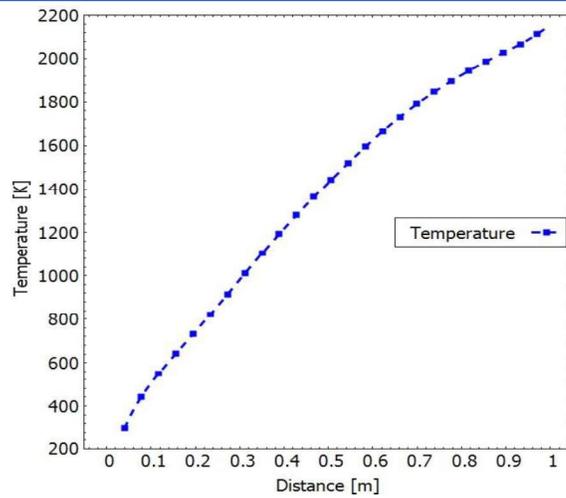


Figure 5.11 Evolution de température de combustion.

En analysant les résultats, on peut en déduire la présence d'une onde de combustion à l'avant de la flamme. Cette onde se caractérise par une diminution de la pression et de la densité, accompagnée d'une accélération des gaz à travers la zone de réaction, où les réactifs sont transformés en produits de combustion.

La flamme est située à la position $x=0$, la propagation de la flamme au cours de la combustion est présentée dans la Figure (5.12)

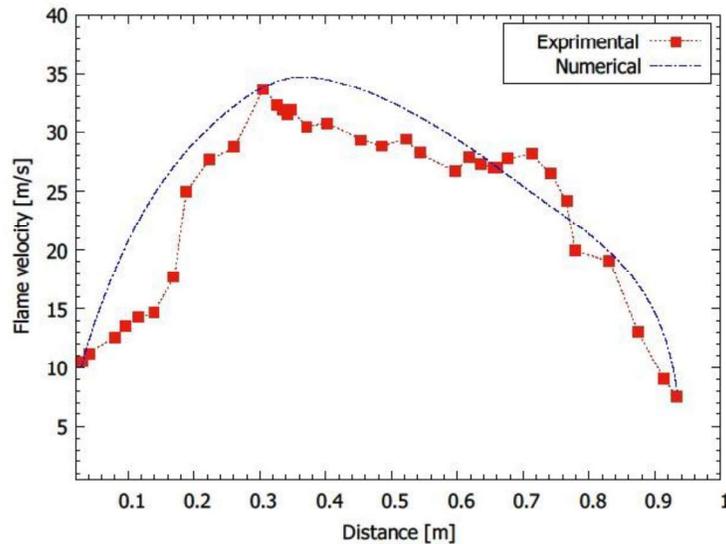


Figure 5.12 Evolution de la vitesse de propagation de la flamme

Conclusion et Perspectives

L'étude présentée ici a permis de confronter les données expérimentales et les simulations numériques concernant le temps de diffusion. Nous avons également exploré l'influence de paramètres environnementaux tels que la gravité et la température sur ce processus, en montrant notamment que la température a un effet direct sur le coefficient de diffusion, et par conséquent sur la vitesse à laquelle les particules se dispersent.

Les résultats expérimentaux, détaillés dans la deuxième partie, ont été confrontés à un modèle numérique. L'excellente adéquation entre les données expérimentales et les résultats de la simulation renforce la confiance que l'on peut accorder aux résultats expérimentaux.

Ce travail fournit une vérification très précise de la compatibilité de la loi de Fick, de la combustion et de la propagation de la flamme d'un mélange hétérogène dans des chambres de combustion fermées. Cette étude vise à utiliser la simulation numérique pour avoir une vision plus réaliste en tenant compte des différents processus impliqués. La simulation numérique de la diffusion passive de masse, qui est le mouvement aléatoire des molécules d'une zone de concentration élevée vers une zone de concentration faible et de la combustion d'un mélange gazeux de propane et d'oxygène dans lequel les composants ne sont pas uniformément répartis dans un tube confiné est régie par les lois de conservation couplées à la loi des gaz idéaux à température élevée. Les paramètres d'écoulement et les concentrations des différentes espèces chimiques sont calculées progressivement en fonction du temps, jusqu'à ce que l'état d'équilibre soit atteint.

Le calcul des paramètres d'écoulement et des concentrations des différentes espèces chimiques se fait pas à pas en fonction du temps jusqu'à l'atteinte de l'état d'équilibre. On a observé que plus la vitesse est élevée, plus la température est élevée et plus la diffusion est exercée rapidement. Ainsi, le taux de production augmente et par conséquent, la vitesse de la flamme augmente, tandis que la pression augmente jusqu'à ce que tous les réactifs soient consommés, suivie d'une diminution de la pression.

Les résultats obtenus nous permettent de mieux comprendre la situation réelle en comparant la théorie aux expériences dans le modèle physique proposé, notamment la combustion.

Ces résultats peuvent être utilisés pour améliorer les modèles de combustion et développer des stratégies de contrôle plus efficaces. Les travaux futurs pourront porter sur l'étude de mélanges

plus complexes, l'inclusion de modèles de turbulence plus raffinés, et l'exploration de conditions de combustion plus extrêmes.

En comparant les résultats de la simulation numérique avec les mesures effectuées dans des situations réelles, on peut :

Valider la précision du modèle physique : si les résultats sont similaires, cela montre que le modèle est capable de reproduire la réalité de manière satisfaisante.

Identifier les écarts entre la théorie et la pratique : si des différences existent, cela permet de mieux comprendre les limitations des modèles théoriques et d'améliorer la simulation numérique en tenant compte de ces écarts.

La comparaison permet de quantifier les écarts entre les prédictions théoriques et les observations expérimentales, révélant ainsi l'influence de paramètres comme la turbulence, le mélange des réactifs ou les hétérogénéités du milieu réactionnel.

References.

- [1]. A.K. Verma et R.G. Sawant, The influence of turbulence on the structure of nonpremixed turbulent flames, *Combustion and Flame*, 236, 111930, 2022.
- [2]. Andrew Pollard et Peter Moin, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, 2001, <https://doi.org/10.1017/CBO9780511665389>
- [3]. Ashurst W. T., Sivashinsky G. I., Yakhot V., 1988, "Flame front propagation in unsteady hydrodynamic flow", *Combust. Sci. Tech.*, vol 62, pp 273 - 295.
- [4]. Azzazen, M. et Salah Boukraa., (2023). Numerical and Experimental Investigation of a Confined Diffusion Flame of Heterogeneous Mixtures Aeronautics and Space Studies Institute, Aeronautical Sciences Laboratory, University of Saad Dahlab Blida 09000, Algeria. <https://doi.org/10.18280/ijht.410216>
- [5]. A. Carlos Fernandez-Pello., Sara McAllister Jyh-Yuan Chen., *Fundamentals of Combustion Processes*. Springer in 2011.
- [6]. Baker W.E., Cox P.A., Westine P.S., Kulesz J.J., 1983, "Explosion hazards and evaluation", *Fundamental Studies in Engineering*, Elsevier
- [7]. Bauwens, C.R., Chaffee, J., Dorofeev, S.B. (2011). Vented explosion overpressures from combustion of hydrogen and hydrocarbon mixtures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(3), 2329-2336. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.04.005>.
- [8]. Beam R.M., Warming R.F., 1982, "An implicit numerical methods for the compressible Navier Stokes and Euler equations. Fluid dynamic Von Karman Institute .
- [9]. Bjerketvedt D., Bakke J.R, Van Wingerden K., 1997, "Gas explosion handbook", *J. Hazardous Materials*, vol 52., pp. 1-150
- [10]. Bobylev, A.V.E. (1982). The Chapman-Enskog and grad methods for solving the Boltzmann equation. In *Akademiia Nauk SSSR Doklady*, 262(1): 71-75.
- [11]. Borghi, Roland et Destriau, Michel. *Combustion and Flame*, Editions OPHRYS, 1995.
- [12]. Bouras et al., 2007, "Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion of a methane jet in air". *Combustion and Flame*, 148(1-2), 1-17. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.02.014>
- [13]. Bradley B., Cresswell T.M., Puttock J.S., 2001, "Flame acceleration due to flameinduced instabilities in large scale explosions", *Combustion and Flame*, vol. 124, pp 551-559
- [14]. Bray K., 1990, "Studies of turbulent burning velocities", *Proceedings of the Royal Society of London*, vol. A531, pp. 315-325

- [15]. Brossard J., Desbordes D., Di Fabio N, Garnier J.L., Lannoy A., Leyer J.C., Perrot J., Saint-Cloud J.P., 1985, "Caractérisation du champ de pression d'un mélange air - hydrocarbure , déflagration lente, déflagration rapide", Rapport UR9679 FR, Commission des Communautés Européennes
- [16]. Bychkov V.V., Liberman, M.A., 2000, "Dynamics and stability of premixed flames", Physics Reports, pp. 115-237
- [17]. Calculs de flammes laminaires pré-mélangées DEA (Diplôme d'Études Approfondies) en Systèmes Complexes ,Phénomènes Hors Equilibre Staffelbach Gabriel juillet 2002.
- [18]. Chourou A., 1988, "Contribution à l'étude des écoulements pulsés des fluides Newtoniens et viscoélastiques dans les conduits déformables", Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, France
- [19]. Christophe Truffin, François Lafon, Laurent Peyret, et Jean-Louis Delhaye, Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion in a gas turbine combustion chamber, Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion in a gas turbine combustion chamber, Combustion and Flame, 163(1), 155-172, 2016, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2015.08.020>
- [20]. Chung, K. (2006). Law Combustion Physics. Cambridge University Press, New-York. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511754517>.
- [21]. Cooper et al., 1986, "On the mechanism of pressure generation in vented explosion", Comb and Flame, vol 65, pp 1-14
- [22]. Crank, J. (1975). The mathematics of diffusion. Clarendon press, Oxford. CRC Press Boca Raton New York
- [23]. Cussler E.L., 1997, " Diffusion : Mass Transfer in Fluid Systems, 2nd edition", Cambridge University
- [24]. D'ambrosio, Domenic, Colonna, Gianpiero, et Capitelli, Mario. Numerical prediction of non-equilibrium flows in hypersonic nozzles: State-to-state kinetics versus macroscopic models. AIAA Paper, 2003, vol. 3549, p. 2003.
- [25]. Daubech J., Proust Ch., Sochet I. , 2006, "Flame front perturbations induced by concentration gradients", 6th Ishpmie, Halifax, Canada, sept 2006
- [26]. Daubech, J. (2008). Contribution to the study of effects of heterogeneity of a gaseous premixed on flame propagation in a closed tube. Doctoral thesis, University of Orleans,

- [28]. Delicat, Yathis Giovanni. Etude de la réactivité de l'iode transporté dans un mélange H₂/H₂O en conditions de combustion dans des flammes basse pression pré-mélangées. 2012. Thèse de doctorat. Lille 1.
- [29]. Deng et al., 2019 , "Large eddy simulation of premixed turbulent combustion with detailed chemistry and radiation". *Combustion and Flame*, 202(1), 182-202.
- [30]. Djemoui, L., Redjem, H. (2017). Numerical study of the swirl direction effect at the turbulent diffusion flame characteristics. *International Journal of Heat and Technology*, 35(3): 520-528. [https:// doi.org/ 10.18280/ ijht.350308](https://doi.org/10.18280/ijht.350308).
- [31]. Dold J.W., Joulin G., 1995, " An evolution equation modelling inversion of tulip flames", *Combustion and Flame*, vol 100, pp 112 - 126.
- [32]. Duplantier C.,1993, "Etudes des effets mécaniques des explosions de gaz sur des structures de formes simples", Thèse de doctorat de l'Université de Poitiers, France
- [33]. Durst et al., 2001, "Large eddy simulation of turbulent combustion". *Progress in Energy and Combustion Science*, 27(2), 1-68. [https://doi.org/10.1016/s0360-1285\(00\)00002-0](https://doi.org/10.1016/s0360-1285(00)00002-0)
- [34]. E. N. Fuller, P. D. Schettler, and J. C. Giddings, *Ind. Eng. Chem.* 58(5), 19, 1966.
- [35]. Eric Goncalvès da Silva, « Méthods et Analyse Numériques », Engineering school. Institut Polytechnique de Grenoble, 2007, pp.99.
- [36]. Esmaeeli A., Tryggvason G., 1996, "An inverse energy cascade in two-dimensional, low Reynolds number bubbly flows", *Journal of Fluid Mechanics*, vol 314, pp 315–330.
- [37]. Evans A.A., 1994, “Deflagrations in spherical vessels : comparison among four approximate burning velocity formulae”, *Combustion and Flame*, vol 97.
- [38]. F. Bouras et al., Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion in a gas turbine combustor with swirl Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion of a methane jet in air, *Combustion and Flame*, (2007)
- [39]. Fethi Bouras, Jean-Louis Delhaye, et Jean-Pierre Legay, Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion of a methane jet in air, *Combustion and Flame*, , 2007, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2007.02.014>
- [40].Fichet, Vincent. Modélisation de la combustion du gaz naturel par réseaux de réacteurs avec cinétique chimique détaillée. 2008. Thèse de doctorat. Ecole Centrale Paris.
- [41]. Fletcher C.A.J., 1990, “ Computation techniques for fluid dynamics, Volume I, 2nd Edition”, Springer-Verlag

- [42]. Gao et al., 2022, "Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion with a new combustion model". *Combustion and Flame*, 243, 111930.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.111930>
- [43]. Girard P., Huneau M., Rabasse C., Leyer J.C., 1978, "Flame propagation through unconfined and confined hemispherical stratified gaseous mixtures.", *Proc. 17th Symp. (Int) on combustion*, Combustion Institute, Pittsburgh, PA, pp. 1247-1255
- [44]. Givi et al., 2020, "Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion in a diesel engine". *Combustion and Flame*, 207, 244-261.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.02.008>
- [45]. Glas A.G., Matkowsky B., Kliencko A.Y., 2001, "Stability of planar flames as gasdynamic discontinuities.", *Journal of Fluid Mechanics*, vol 491, pp 51-63
- [46]. Glassman I., 1987, "Combustion", 2nd Edition, Academic Press Inc
- [47]. Grossel, Stanley S. *Deflagration and detonation flame arresters*. John Wiley & Sons, 2010.
- [48]. Gülen, S. (2019). *Combustion in Gas Turbines for Electric Power Generation*. Cambridge University Press, Cambridge, pp.308-361.
<https://doi.org/10.1017/9781108241625>.
- [49]. H. Pitsch et al., Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion of a premixed flame, *Combustion and Flame*, 144(1-2), 23-40 (2006)
- [50]. Henneon N., 2007, "Propagation d'une flamme de prémélange gazeux d'une enceinte vers un tube : études des mécanismes de transmission et de coincement au changement de section", Thèse de Doctorat de l'Université de Poitiers
- [51]. Herbert Pitsch, Hans-Peter Kuerten, et Peter Moin, Large eddy simulation of nonpremixed turbulent combustion of a premixed flame, *Combustion and Flame*, 144(1-2), 23-40, 2005.
- [52]. Herbert Pitsch, Simulation of turbulent combustion: Progress and challenges, *Progress in Energy and Combustion Science*, 52, 1-34, 2016,
<https://doi.org/10.1016/j.pecs.2015.08.001>
- [53]. Herbin R., 2006; "Cours : Analyse numérique des équations aux dérivées partielles", Université Aix Marseille 1, France
- [54]. Hirano T., Suzuki T., Mashiko I., Iwai K., 1977, "Flame propagation through mixtures with concentration gradients.", *Proc. 16th Symp. (Int) on combustion*, Combustion Institute, Pittsburgh, PA, pp. 1307-1315

- [55]. Hirsch C., 1988, "Numerical computation of internal and external flow , Vol 1 : Fundamental numerical discretization", Willey <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.09.009>
- [56]. J.Crank (The Mathematics of Diffusion) Oxford University ,Ress York 'Edition 1990 '.
- [57]. J.P. Pérez et A.M. Romulus, Thermodynamique. Fondements et applications, Masson, Paris, 1993.
- [58]. Jaffe, R., Taylor, W. (2018). Internal Combustion Engines, In the Physics of Energy. Cambridge University Press, Cambridge, pp. 203-218. <https://doi.org/10.1017/9781139061292>.
- [59]. Janovsky B., Podstawka T., Horkel J. Vejs L., 2004, "Vented confined explosions : experiments and AutoReagas simulation", communication at the 11th Loss Prev. and Safety promotion in the Process Ind., Praha, Czeck Republic, June 2004
- [60]. Jean-Pierre Corriou, Thermodynamique et cinétique chimique, pack : Opérations unitaires. Génie de la réaction chimique, univers : Procédés chimie - bio - agro, J 1025, pp. 1-19, 1984. John Wiley & sons, inc. New York Edition 1993
- [61]. Kerampran S., 2000, "Etudes des mécanismes d'accélération des flammes se propageant depuis l'extrémité fermée vers l'extrémité ouverte des tubes horizontaux de longueur variable", Thèse de Doctorat, Université de Poitiers, France
- [62]. Khul Al, Leyer J-C, Borisov AA, Sirignano W.A., 1973, "Dynamic Aspects of Explosion Phenomena.", Progress in Astronautics and Aeronautics, vol. 154, AIAA, Washington, pp. 185-194
- [63]. Koroll G.W., Kumar R.K., Bowles E.M., 1994, "Burning velocities of hydrogen-air mixture", Combustion and Flame, vol 94, pp 330 - 340
- [64]. Kuo K.K, 2005, "Principles of combustion, Second Edition", Willey
- [65]. Kuo, K., Acharya, R. (2012). Fundamentals of Turbulent and Multiphase Combustion. John Wiley & Sons. <https://doi.org/10.1002/9781118107683>.
- [66]. Lewis B., Von Elbe G., 1987, "Combustion, flames and explosions of gases : 3rd edition ", Academic Press, London, ISBN 0-12-446751-2
- [67]. Li et al., 2022, "Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion with a hybrid chemical model". Combustion and Flame, 242, 111881.
- [68]. M. V. Salvetti et S. B. Pope Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion, (Cambridge University Press, 2011)

- [69]. Moin, H., & Moin, S. (2009). Numerical methods for large-eddy simulation of turbulence. Cambridge University Press.
- [70]. MacCormack R.W., 1982, "A numerical method for solving the equations of compressible viscous flow", AIAA Journal, vol 20, pp 1275-1281
- [71]. Mallard E., Le Chatelier H., 1885, "Recherches expérimentales et théoriques sur la combustion des mélanges gazeux explosifs, Ann. Mines, vol 8, p274
- [72]. Ming Deng, Wei Li, et Xiao-Wei Li, Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion with detailed chemistry and radiation, Combustion and Flame, 202(1), 182-202, 2018, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.09.009>
- [73]. Moin, 2006, "Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion". Annual Review of Fluid Mechanics, 38(1), 539-578. <https://doi.org/10.1146/annurev.fluid.38.061004.102133>
- [74]. Oran, E.S. & Boris, J.P., 2001, " Numerical simulation of reactive flow ", 2nd edition. Cambridge University Press. ISBN 0-521-58175-3
- [75]. Poinssot, Y., & Candel, S. Combustion and dynamics of premixed turbulent flames. Springer Science & Business Media. , 2014.
- [76]. Peters, N. Turbulent combustion. Cambridge University Press, 2000.
- [77]. par Xiao-Wei Li, Large eddy simulation of turbulent combustion: A review of recent advances, Progress in Energy and Combustion Science, 65, 1-37, 2020, <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2019.12.001>
- [78]. par Xin Gao, Ming Deng, Wei Li, et Xiao-Wei Li, Large eddy simulation of nonpremixed turbulent combustion with a new combustion model, Combustion and Flame, 243, 111930, 2022, <https://doi.org/10.1111/cla.15426U50>
- [79]. Peter Maas, et Jürgen Warnatz, Large eddy simulation of turbulent combustion, par Andreas Durst, Richard Friedrich, Progress in Energy and Combustion Science, 27(2), 1-68, 2001, [https://doi.org/10.1016/S0360-1285\(00\)00014-X](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(00)00014-X)
- [80]. Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P., 2001, "The properties of gases and liquids, Fifth Edition", McGraw-Hill International Editions
- [81]. Proust Ch., Leprette E., Daubech J., Sochet I., 2007, "The Usefulness of Phenomenological Tools to Simulate the Consequences of Dust Explosions", Proceeding of Loss Prevention Congress, Houston

- [82]. Ricoud, F., et al. Large-eddy simulation of premixed turbulent combustion using filtered Lagrangian combustion models. *Progress in Energy and Combustion*, 78, 100807,2020.
- [83]. S. Gao, Y. Li et J.Y. Chen, A new combustion model for large eddy simulation of nonpremixed turbulent combustion, *Combustion and Flame*, 243, 111930, 2022.
- [84]. Sengissen, A.X., Poinso, T.J., Van Kampen, J.F., Kok, J.B. (2007). Response of a swirled non-premixed burner to fuel flow rate modulation. In *Complex Effects in Large Eddy Simulations*, pp. 337-351. https://doi.org/10.1007/978-3-540-34234-2_24.
- [85]. Sochet I., Gillard P., Guelon F., 2006 , " Effect of the concentration distribution on the gaseous deflagration propagation in the case of H₂/O₂ mixture", *Journal of Loss Prevention Process Industry*, vol 19, pp 250 – 263
- [86]. Sun, Y., et al. A hybrid RANS/LES approach for simulating premixed turbulent combustion in gas turbines. *Computers & Fluids*, 222, 1049,2021.
- [87]. Sun et al., 2022 , "Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion with a reduced-order chemistry model". *Combustion and Flame*, 243, 111929. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.11192>
- [88]. Thierry, P., Denis, V. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion*. 2nd Edition, Edwards, Pa, USA. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2005.11.002>.
- [89]. Xin Gao, Ming Deng, Wei Li, et Xiao-Wei Li, Large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion with a new combustion model, *Combustion and Flame*, 243, 111930, 2022.
- [90]. Y. Li, S. Gao et J.Y. Chen, *Applied Thermal Engineering*, 178, 115373, 2022.
- [91]. Wang, H., et al. Reynolds-stress/filtered Lagrangian combustion modeling of premixed turbulent flames with detailed chemistry. *Combustion and Flame*, 218, 105082,2020.

Annexe 1:

Principe de modélisation :

Configuration de base

$$\rho_1 \cdot u_1 = \rho_2 \cdot u_2$$

$$P_1 + \rho_1 \cdot u_1^2 = P_2 + \rho_2 \cdot u_2^2$$

α = taux d'expansion

M = Nombre de mach

avec

$$P_1 = \rho_1 \cdot R_1 \cdot T_1$$

$$P_2 = \rho_2 \cdot R_2 \cdot T_2$$

$$\frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{P_1}{P_2} \cdot \frac{T_2}{T_1} \cdot \frac{R_2}{R_1} \approx \frac{R_2}{R_1} \cdot \alpha,$$

$$\frac{\delta P_1}{P_1} = \pm \gamma_1 \frac{\delta u_1}{C_1} \text{ et } \frac{\delta P_2}{P_2} = \mp \gamma_2 \frac{\delta u_2}{C_2}$$

Su -> Su + δ Su

l'écart entre δu_1 et δ Su qui s'écrit :

$$\delta Sa = \delta Su - \delta u_1$$

$$(\rho_1 + \delta \rho_1) \cdot (u_1 + \delta u_1 + \delta Sa) = (\rho_2 + \delta \rho_2) \cdot (u_2 + \delta u_2 + \delta Sa)$$

Si on néglige les termes d'ordre 2 ($\delta \cdot \delta$) :

$$\left(\frac{\delta u_1}{u_1} + \frac{\delta Sa}{u_1} \right) + \frac{\delta \rho_1}{\rho_1} = \left(\frac{\delta u_2}{u_2} + \frac{\delta Sa}{u_2} \right) + \frac{\delta \rho_2}{\rho_2}$$

Pour l'équation de quantité de mouvement, on a :

$$\frac{P_2}{P_1} = 1 + \frac{\rho_1 \cdot u_1^2}{P_1} - \frac{\rho_2 \cdot u_2^2}{P_2} = 1 + \frac{M_1^2}{\gamma_1} - \frac{M_2^2}{\gamma_2} \text{ d'où } \frac{P_2}{P_1} \approx 1$$

et sous forme variationnelle : $\frac{\delta P_1}{P_1} = \frac{\delta P_2}{P_2}$

En remarquant que $\frac{T_2}{T_1} \approx \alpha$.

et on obtient sous la forme variationnelle :

$$\frac{\delta T_1}{T_1} = \frac{\delta T_2}{T_2}$$

la formulation de l'équation d'état des gaz parfaits s'écrit

$$\frac{\delta P_1}{P_1} - \frac{\delta \rho_1}{\rho_1} - \frac{\delta T_1}{T_1} = \frac{\delta P_2}{P_2} - \frac{\delta \rho_2}{\rho_2} - \frac{\delta T_2}{T_2} = 0$$

Finalement, on obtient :

$$\frac{\delta \rho_1}{\rho_1} = \frac{\delta \rho_2}{\rho_2}$$

En introduisant cette relation on obtient

$$\frac{\delta S u}{u_1} = \frac{\delta u_2 - \delta u_1 + \delta S u}{u_2} \Rightarrow \delta u_2 - \delta u_1 = \left(\frac{u_2}{u_1} - 1 \right) \delta S u$$

d'après l'équation de continuité

$$\frac{u_2}{u_1} = \frac{\rho_1}{\rho_2} = \frac{R_2}{R_1} \alpha,$$

on trouve :

$$\delta u_2 - \delta u_1 = \left(\frac{R_2}{R_1} \alpha - 1 \right) \cdot \delta S t$$

hypothèses :

La combustion est isochore

La combustion est adiabatique

Considérons un volume de longueur L et de section S_{tube} (volume globale $V_0 = L \cdot S$).

On suppose que la flamme est à l'abscisse x_f .

Flamme plane

Dans V_0 la combustion est isochore.

D'après la loi de conservation de la masse

$$\rho_1 \cdot V_1 + \rho_2 \cdot V_2 = \rho_{10} \cdot V_0$$

avec $V_1 =$ Volume occupé par les gaz frais ,

$V_2 =$ Volume occupé par les gaz brûlés

avec $V_1 = (L - x_f) \cdot S_{tube}$ et $V_2 = x_f \cdot S_{tube}$,

et $\rho_{20} = \frac{\rho_{10}}{\lambda'}$ et $\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{1}{\alpha'}$ avec $\alpha' = \frac{R_2}{R_1} \alpha$

compression adiabatique des gaz:

$$\frac{\rho_1}{\rho_{10}} = \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{\gamma_1}} \text{ et } \frac{\rho_2}{\rho_{20}} = \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{1}{\gamma_2}}$$

$$(\rho_1 + \delta\rho_1) \cdot (V_1 + \delta V_1) + (\rho_2 + \delta\rho_2) \cdot (V_2 + \delta V_2) = \rho_{10} \cdot V_0$$

$$\frac{\rho_1}{\rho_{10}} \cdot \frac{\delta V_1}{V_0} + \frac{V_1}{V_0} \frac{\delta\rho_1}{\rho_1} \frac{\rho_1}{\rho_{10}} + \frac{V_2}{V_0} \frac{\delta\rho_2}{\rho_2} \frac{\rho_2}{\rho_{10}} + \frac{\rho_2}{\rho_{10}} \frac{\delta V_2}{V_0} = 0$$

Sachant que $\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{1}{\alpha'}$

et sous l'hypothèse que $\gamma_1 \approx \gamma_2$, $\frac{\delta P}{P} = \frac{\rho_1}{\rho_{10}} \cdot \frac{\gamma_1}{\alpha'} (\alpha' - 1) \cdot \frac{\delta x_f}{L_{tube}}$

δx_f en fonction de Su .

D'après la définition de x_f :

$$\frac{\delta x_f}{\delta t} = Su = \frac{\delta V_2}{S \cdot \delta t}$$

$$Su = \frac{\rho_2}{\rho_1} \cdot \frac{\delta\rho_2}{\rho_2 \cdot \delta t} \cdot x_f + \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{\delta x_f}{\delta t},$$

$$Su = \frac{1}{\alpha'} \cdot \frac{1}{\gamma_1} \cdot \frac{\delta P}{P \cdot \delta t} \cdot x_f + \frac{1}{\alpha'} \cdot \frac{\delta x_f}{\delta t}$$

En combinant cette expression avec cette l'équation on obtient

$$Su = \frac{1}{\lambda'} \left(\frac{\rho_1}{\rho_{10}} \cdot \frac{\alpha' - 1}{\alpha'} \right) \cdot \frac{x_f}{L} \cdot \frac{\delta x_f}{\delta t} + \frac{1}{\alpha'} \cdot \frac{\delta x_f}{\delta t}$$

$$\delta x_f = \frac{\alpha' \cdot Su \cdot \delta t}{1 + \frac{\rho_1}{\rho_{10}} \cdot \frac{\alpha' - 1}{\alpha'} \cdot \frac{x_f}{L_{tube}}}, \text{ ce qui introduit dans donne :}$$

Le groupe d'expressions constitue le modèle de flamme.

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0$$

Equation de quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial P}{\partial x} = 0$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho uv}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial P}{\partial y} = 0$$

Equation d'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) \right) + \frac{\partial \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + P \right) u}{\partial x} + \frac{\partial \left(\rho e + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2) + P \right) v}{\partial y} = 0$$

avec $e = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)} = c_v \cdot T$

Equation d'état $P = \rho \cdot r \cdot T$

Soit globalement : $e = \frac{P}{\rho(\gamma - 1)} = c_v \cdot T$ et $P = \rho \cdot r \cdot T$

Choix d'une méthode de résolution

une dérivée première de la vitesse, u, entre les points i et i+1 distants de Δx

s'écrit $u' = \frac{u_{i+1} - u_i}{\Delta x}$

l'équation de conservation d'énergie appliquée sur un volume élémentaire ΔV de taille $\Delta x \cdot \Delta y$

s'écrit :

$$\frac{dE_t}{dt} = \dot{m}_x \cdot h_{t_x} - \dot{m}_{x+\Delta x} \cdot h_{t_{x+\Delta x}} + \dot{m}_y \cdot h_{t_y} - \dot{m}_{y+\Delta y} \cdot h_{t_{y+\Delta y}}$$

E_t est l'énergie totale dans ΔV

h_t est l'enthalpie totale des flux de masse selon x et y à travers des frontières de ΔV .

x : $u(x) = \sum_{i=0}^N a_i \cdot P_i(x)$,

$P_i(x)$ sont des polynômes connus (par exemple un développement de Taylor de $u(x)$, $P_i(x) = x^i$)

a_i des coefficients à déterminer.

MacCormack a validé en premier lieu cette méthode pour le cas des équations de Navier Stokes en négligeant .

la viscosité,

les forces de volumes

les sources de chaleur.

Il est précis au second ordre en espace et en temps

Il préserve la forme conservative des équations

Il est simple et direct à programmer

$$\Delta t \leq (\Delta t)_{CFL} = \frac{1}{\frac{|u|}{\Delta x} + \frac{|v|}{\Delta y} + C \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}}}$$

$$F^{n+1} = F^{n+1} + \varepsilon_x \Delta x^2 \frac{\partial^2 F^{n+1}}{\partial x^2} + \varepsilon_y \Delta y^2 \frac{\partial^2 F^{n+1}}{\partial y^2}$$

$$F^{n+2} = F^{n+2} + \varepsilon_x \Delta x^2 \frac{\partial^2 F^{n+2}}{\partial x^2} + \varepsilon_y \Delta y^2 \frac{\partial^2 F^{n+2}}{\partial y^2}$$

Les conditions sont les suivantes :

Gaz parfait

$$\frac{P_4}{P_1} = \frac{2 \cdot \gamma \cdot M_1 - (\gamma_e - 1)}{\gamma + 1} \cdot \frac{1}{\left[1 - \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \cdot \frac{C_1}{C_4} \left(M_1 - \frac{1}{M_1} \right) \right]^{\frac{2\gamma}{\gamma - 1}}}$$

P_2 et u_2 se déduisent de M_1 :

$$\frac{P_2}{P_1} = \frac{2 \cdot \gamma \cdot M_1^2 - (\gamma - 1)}{\gamma - 1}$$

$$u_2 = \frac{2 \cdot C_1}{\gamma + 1} \left(M_1 - \frac{1}{M_1} \right)$$

La célérité de l'onde est alors: $D = C_1 \cdot M_1$

La pression réfléchie se déduit de P_2 :

$$\frac{\text{Pr}}{P_2} = \frac{(3\gamma - 1) \frac{P_2}{P_1} - (\gamma - 1)}{(\gamma + 1) + (\gamma - 1) \frac{P_2}{P_1}}$$

Annexe 2:

Mécanisme de combustion par tranches.

– Combustion adiabatique à pression constante

Un calcul de la température de combustion à ;

$P(I-1)$ permet d'aboutir à la valeur

$T(I,I)=(T_{fi}-T_o)+T(I-1,I)$:

T_{fi} représente la température de flamme à pression constante

$$X'(I,I) = X(I-1,I) \frac{T(I,J)}{T(I-1,J)} \cdot \frac{N_b}{N_f}$$

Compression adiabatique jusqu'à l'équilibre des pressions on peut écrire les système suivant

Pour les tranches de gaz brûlés c'est à dire pour $J < I$

$$X(I,J).P(I)^{\frac{1}{\gamma_b}} = X(I-1,J).P(I-1)^{\frac{1}{\gamma_b}}$$

Pour la tranche qui vient de brûler, c'est à dire $J = I$

Pour les tranches de gaz frais, c'est à dire pour $J > I+1$

$$X(I,J).P(I)^{\frac{1}{\gamma_f}} = X(I-1,J).P(I-1)^{\frac{1}{\gamma_f}}$$

γ_f et γ_b sont respectivement les coefficients de compression adiabatique des gaz frais et des gaz brûlés.

Sachant que le volume est constant :

$$\sum_{j=1}^N X(I,J) = 1$$

On obtient finalement une expression permettant de déduire $P(I)$ de $P(I-1)$:

$$\sum_{J=1}^{I-1} \left(\frac{P(I-1)}{P(I)} \right)^{\frac{1}{\gamma_b}} \left(\sum_{J=1}^{I-1} X(I-1,J) + X'(I,I) \right) + \sum_{J=I+1}^N \left(\frac{P(I-1)}{P(I)} \right)^{\frac{1}{\gamma_f}} X(I-1,J) = 1$$

Si on pose

$$A = X'(I,I) + \sum_{J=1}^{I-1} X(I-1,J) \quad B = \sum_{J=I+1}^N X(I-1,J) \quad Y = \frac{P(I-1)}{P(I)}$$

La relation s'écrit alors : $Y^{1/\gamma_b} .A + Y^{1/\gamma_f} .B = 1$

En posant : $F(Y) = Y^{1/\gamma_b} .A + Y^{1/\gamma_f} .B - 1$

La formule de Newton s'écrit :

$$Y_{i+1} = Y_i - \frac{F(Y)}{F'(Y)}$$

Pour laquelle l'erreur est :

$$\Delta Y = \frac{1}{2} \frac{F''(Y)}{F'(Y)} (Y_{i+1} - Y_i)^2$$

Connaissant P(I), on peut déterminer les températures T(I,J) dans les différentes tranches de gaz lorsque la tranche I vient de brûler

Pour les tranches de gaz brûlés, c'est à dire $J \leq I$

$$X(I, J) = X(I-1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I-1)} \right)^{-1/\gamma_b} = X(I-1, J) \cdot Y^{+1/\gamma_b}$$

$$T(I, J) = T(I-1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I-1)} \right)^{(\gamma_b-1)/\gamma_b} = T(I-1, J) \cdot Y^{(\gamma_{bi}-1)/\gamma_{bi}}$$

Pour les tranches de gaz frais, c'est à dire $J > I$

$$X(I, J) = X(I-1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I-1)} \right)^{-1/\gamma_f} = X(I-1, J) \cdot Y^{+1/\gamma_f}$$

$$T(I, J) = T(I-1, J) \cdot \left(\frac{P(I)}{P(I-1)} \right)^{(\gamma_f-1)/\gamma_f} = T(I-1, J) \cdot Y^{(\gamma_f-1)/\gamma_f}$$

Le modèle de combustion s'écrit pour la tranche I de masse ΔM :

$$\Delta M = \rho_f(I-1) \cdot A_f \cdot \text{Su} \cdot \Delta t$$

Avec $\rho_f(I-1)$ est la masse volumique de la tranche I avant sa combustion = $\rho_0 \cdot \left(\frac{P}{P_0} \right)^{1/\gamma_f}$

ρ_0 est la masse volumique initiale du prémélange

Annexe 3:

Coefficients de Sensibilité

Coefficient de sensibilité par rapport aux coefficients de débit

Dans les calculs de flamme :

$$S = \frac{F(2k) - F(0.5k)}{1.5k} \frac{k}{F(k)} = \frac{F(2k) - F(0.5k)}{1.5F(k)}$$

F est une valeur cible. S est calculé par le code Chemkin.

Pour les calculs sans flamme, nous utilisons la formule des différences finies à deux

côtés

$$S = \frac{F(2k) - F(0.5k)}{1.5k} \frac{k}{F(k)} = \frac{F(2k) - F(0.5k)}{1.5F(k)}$$

:Coefficient de sensibilité par rapport aux chaleurs de formation

Dans les calculs de flamme :

$$S = \frac{\partial \log F(\Delta_f H)}{\partial \log(\exp(\Delta_f H/RT))} = \frac{\partial F(\Delta_f H)}{\partial \Delta_f H} \frac{RT}{F(\Delta_f H)}$$

$$S = \frac{\partial \log F(k)}{\partial \log k} = \frac{\partial F(k)}{\partial k} \frac{k}{F(k)}$$

$S \times \Delta_f H/RT$ est calculé par le code Chemkin.

Pour les calculs sans flamme :

$$S = \frac{F(\Delta_f H + \delta) - F(\Delta_f H - \delta) RT}{F(\Delta_f H) 2\delta}$$

Les températures suivantes ont été utilisées dans le calcul du coefficient de sensibilité

En ce qui concerne les séries de formation :

Pour les expériences en tube de choc et en réacteur - température initiale

Pour les expériences à la flamme basse pression (chimie N) - température au pic de concentration enCH ou en NC

Pour les vitesses de flamme - 1000 K

Pour tous les calculs $\delta = 1000$ cal.

description of the target

Target CH₃.C₂:

Maximum CH₃ concentration in shock tube oxidation of ethane Mixture:

C₂H₆-O₂-Ar (295ppm-0.1055%-99.865%),

phi = 0.769, P = 1.17 atm, T = 1794 K

TARGET VALUES

Experimental(ppm)	GRI-Mech 2.11	Triad Mech	GRI-Mech 3.0
342	324	363	326

Annexe 4:

Propriétés des gaz. [5].

Formula	Fuel	M (kg/kmol)	T _b (°C)	c _{pg} ^a (kJ/kg-K)	T _{ig} (°C)	HHV (MJ/kg)	LHV (MJ/kg)	h _{fg} ^b (kJ/kg)	AFRs	T _f (K) ^c	Δh ⁰ (kJ/mol)	RON ^d	MON ^e
CH ₄	Methane	16.04	-161	2.21	537	55.536	50.048	510	17.2	2,226	-74.4	120	120
C ₂ H ₂	Acetylene	26.04	-84	1.60	305	49.923	48.225	-	13.2	2,540	8.7	50	50
C ₂ H ₄	Ethylene	28.05	-104	1.54	490	50.312	47.132	-	14.7	2,380	52.4	-	-
C ₂ H ₆	Ethane	30.07	-89	1.75	472	51.902	47.611	489	16.1	2,370	-83.8	115	99
C ₃ H ₈	Propane	44.10	-42	1.62	470	50.322	46.330	432	15.7	2,334	-104.7	112	97
C ₄ H ₁₀	n-Butane	58.12	-0.5	1.64	365	49.511	45.725	386	15.5	2,270	-146.6	94	90
C ₄ H ₁₀	iso-Butane	58.12	-12	1.62	460	49.363	45.577	366	15.5	2,310	-153.5	102	98
C ₅ H ₁₂	n-Pentane	72.15	36	1.62	284	49.003	45.343	357	15.3	2,270	-173.5	62	63
C ₅ H ₁₂	iso-Pentane	72.15	28	1.60	420	48.909	45.249	342	15.3	2,310	-178.5	93	90
C ₆ H ₁₄	n-Hexane	86.18	69	1.62	233	48.674	45.099	335	15.2	2,271	-198.7	25	26
C ₆ H ₁₄	iso-Hexane	86.18	50	1.58	421	48.454	44.879	305	15.2	2,300	-207.4	104	94
C ₇ H ₁₆	n-Heptane	100.20	99	1.61	215	48.438	44.925	317	15.2	2,273	-224.2	0	0
C ₈ H ₁₈	n-Octane	114.23	126	1.61	206	48.254	44.786	301	15.1	2,275	-250.1	20	17
C ₈ H ₁₈	iso-Octane	114.23	114	1.59	418	48.119	44.651	283	15.1	2,300	-259.2	100	100
C ₉ H ₂₀	n-Nonane	128.6	151	1.61	-	48.119	44.688	295	15.1	2,274	-274.7	-	-
C ₁₀ H ₂₂	n-Decane	142.28	174	1.61	210	48.002	44.599	277	15.1	2,278	-300.9	-41	-38
C ₁₀ H ₂₂	iso-Decane	142.28	171	1.61	-	48.565	44.413	-	15.1	2,340	-	113	92
C ₁₂ H ₂₆	n-Dodecane	170.33	216	1.61	204	47.838	44.574	256	15.0	2,276	-350.9	-88	-90
CH ₃ O	Methanol	32.04	65	1.37	385	22.663	19.915	1,099	6.5	2,183	-201.5	106	92
C ₂ H ₆ O	Ethanol	46.07	78	1.42	365	29.668	26.803	836	9.0	2,144	-235.1	107	89
H ₂	Hydrogen	2.02	-253	14.47	400	141.72	119.96	451	34.3	2,345	0	-	-

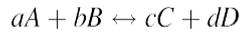
^a Gas phase specific heat evaluated at 25°C^b Heat of vaporization at 1 atm^c Estimated equilibrium flame temperature^d Research octane number^e Motoring octane number

Ideal gases are assumed for combustion gases. The enthalpy, $\hat{h}(T)$, of a gaseous species consists of two parts: (1) enthalpy of formation at the standard condition (25°C and 1 atm) and (2) sensible enthalpy. Enthalpy of a species is evaluated by

$$\hat{h}(T) = \Delta\hat{h}^0 + (\hat{h}_s(T) - \hat{h}_s(T = 25^\circ\text{C})) = \Delta\hat{h}^0 + (\hat{h}_s(T) - \hat{h}_s^0)$$

This formula can be extended to include phase change from liquid to gas by including the latent heat of vaporization.

For an elementary reaction



the equilibrium constant based on concentrations, $K_c = k_f/k_b$, can be determined by thermodynamics properties as

$$K_c = \frac{k_f}{k_b} = \frac{[C]_{eq}^c [D]_{eq}^d}{[A]_{eq}^a [B]_{eq}^b} = K_p(T) \left(\frac{\hat{R}_u T}{1 \text{ atm}} \right)^{a+b-c-d}$$

where $K_p(T) = \exp\left\{a \frac{\hat{g}_A^0}{\hat{R}_u T} + b \frac{\hat{g}_B^0}{\hat{R}_u T} - c \frac{\hat{g}_C^0}{\hat{R}_u T} - d \frac{\hat{g}_D^0}{\hat{R}_u T}\right\}$ is the equilibrium constant based on partial pressures and $\hat{g}_i^0(T) = \hat{h}_i(T) - T\hat{s}_i^0(T)$ is the Gibbs free energy at reference pressure (1 atm).

Annexe 5:

Propriétés du propane **O₂** [5].

O ₂				
T (K)	\hat{c}_p (kJ/kmol-K)	$\hat{h} - \hat{h}^0$ (MJ/kmol)	\hat{s} (kJ/kmol-K)	$\hat{g}^0/\hat{R}_u T$
200	28.47	-2.84	193.51	-24.98
250	28.9	-1.4	199.91	-24.72
298	29.31	0	205.03	-24.66
300	29.33	0.05	205.21	-24.66
350	29.77	1.53	209.77	-24.7
400	30.21	3.03	213.77	-24.8
450	30.66	4.55	217.36	-24.93
500	31.11	6.1	220.61	-25.07
550	31.57	7.66	223.6	-25.22
600	32.03	9.25	226.36	-25.37
650	32.48	10.87	228.94	-25.53
700	32.93	12.5	231.37	-25.68
750	33.35	14.16	233.65	-25.83
800	33.76	15.84	235.82	-25.98
850	34.13	17.53	237.88	-26.13
900	34.45	19.25	239.84	-26.28
950	34.73	20.98	241.71	-26.42

(continued)

O₂ (continued)

T (K)	\hat{c}_p (kJ/kmol-K)	$\hat{h} - \hat{h}^0$ (MJ/kmol)	\hat{s} (kJ/kmol-K)	$g^0/\hat{R}_u T$
1,000	34.93	22.72	243.49	-26.55
1,050	35.1	24.47	245.2	-26.69
1,100	35.27	26.23	246.84	-26.82
1,150	35.43	28	248.41	-26.95
1,200	35.59	29.77	249.92	-27.08
1,250	35.75	31.56	251.38	-27.2
1,300	35.9	33.35	252.78	-27.32
1,350	36.05	35.15	254.14	-27.44
1,400	36.2	36.95	255.46	-27.55
1,450	36.35	38.77	256.73	-27.66
1,500	36.49	40.59	257.96	-27.77
1,550	36.63	42.42	259.16	-27.88
1,600	36.77	44.25	260.33	-27.99
1,650	36.9	46.09	261.46	-28.09
1,700	37.03	47.94	262.56	-28.19
1,750	37.17	49.8	263.64	-28.29
1,800	37.29	51.66	264.69	-28.38
1,850	37.42	53.53	265.71	-28.48
1,900	37.54	55.4	266.71	-28.57
1,950	37.67	57.28	267.69	-28.66
2,000	37.79	59.17	268.64	-28.75
2,050	37.9	61.06	269.58	-28.84
2,100	38.02	62.96	270.49	-28.93
2,150	38.14	64.86	271.39	-29.01
2,200	38.25	66.77	272.27	-29.1
2,250	38.36	68.69	273.13	-29.18
2,300	38.47	70.61	273.97	-29.26
2,350	38.58	72.53	274.8	-29.34
2,400	38.68	74.46	275.61	-29.42
2,450	38.79	76.4	276.41	-29.5
2,500	38.89	78.34	277.2	-29.57
2,550	38.99	80.29	277.97	-29.65
2,600	39.09	82.24	278.73	-29.72
2,650	39.19	84.2	279.47	-29.79
2,700	39.29	86.16	280.2	-29.86
2,750	39.38	88.13	280.93	-29.94
2,800	39.48	90.1	281.64	-30
2,850	39.57	92.07	282.34	-30.07
2,900	39.66	94.06	283.03	-30.14
2,950	39.75	96.04	283.7	-30.21
3,000	39.84	98.03	284.37	-30.27
3,050	39.93	100.03	285.03	-30.34
3,100	40.02	102.02	285.68	-30.4
3,150	40.11	104.03	286.32	-30.47
3,200	40.19	106.03	286.96	-30.53

O₂ (continued)

T (K)	\hat{c}_p (kJ/kmol-K)	$\hat{h} - \hat{h}^0$ (MJ/kmol)	\hat{s} (kJ/kmol-K)	$g^0/\hat{R}_u T$
3,300	40.36	110.06	288.2	-30.65
3,350	40.44	112.08	288.8	-30.71
3,400	40.52	114.11	289.4	-30.77
3,450	40.6	116.13	290	-30.83
3,500	40.68	118.17	290.58	-30.89

Annexe 6:

Propriétés du propane C_3H_8 [5].

C_3H_8				
T (K)	\hat{c}_p (kJ/kmol-K)	$\hat{h} - \hat{h}^0$ (MJ/kmol)	\hat{s} (kJ/kmol-K)	$g^0 / \hat{R}_u T$
200	52.35	-6.19	245.27	-95.68
250	63.29	-3.3	258.13	-82.6
298	73.55	0	270.16	-74.39
300	73.94	0.14	270.62	-74.13
350	84.23	4.09	282.8	-68.3
400	94.1	8.55	294.69	-64.1
450	103.5	13.49	306.32	-60.99
500	112.4	18.89	317.69	-58.65
550	120.79	24.73	328.8	-56.85
600	128.63	30.96	339.65	-55.46
650	135.95	37.58	350.24	-54.39
700	142.74	44.55	360.57	-53.56
750	149.03	51.85	370.63	-52.92
800	154.86	59.44	380.44	-52.44
850	160.26	67.32	389.99	-52.08
900	165.31	75.47	399.3	-51.82
950	170.06	83.85	408.36	-51.65
1,000	174.61	92.47	417.2	-51.55
1,050	178.22	101.29	425.81	-51.51
1,100	181.68	110.29	434.18	-51.52
1,150	184.99	119.45	442.33	-51.57
1,200	188.16	128.78	450.27	-51.66
1,250	191.18	138.27	458.01	-51.78
1,300	194.07	147.9	465.57	-51.92
1,350	196.82	157.67	472.95	-52.09
1,400	199.45	167.58	480.15	-52.28
1,450	201.95	177.61	487.19	-52.48
1,500	204.33	187.77	494.08	-52.7
1,550	206.59	198.05	500.82	-52.93
1,600	208.74	208.43	507.41	-53.17
1,650	210.79	218.92	513.87	-53.42
1,700	212.72	229.51	520.19	-53.68
1,750	214.56	240.19	526.38	-53.94
1,800	216.3	250.96	532.45	-54.21
1,850	217.94	261.82	538.4	-54.49
1,900	219.5	272.75	544.23	-54.77
1,950	220.96	283.77	549.95	-55.05
2,000	222.35	294.85	555.56	-55.34
2,050	223.65	306	561.07	-55.62
2,100	224.88	317.21	566.47	-55.91
2,150	226.03	328.48	571.78	-56.21
2,200	227.11	339.81	576.99	-56.5
2,250	228.12	351.19	582.1	-56.79
2,300	229.07	362.63	587.13	-57.09
2,350	229.96	374.1	592.06	-57.38
2,400	230.79	385.62	596.91	-57.68

C₃H₈ (continued)

T (K)	\hat{c}_p (kJ/kmol-K)	$\hat{h} - \hat{h}^0$ (MJ/kmol)	\hat{s} (kJ/kmol-K)	$g^0 / \hat{R}_u T$
2,450	231.57	397.18	601.68	-57.97
2,500	232.29	408.78	606.37	-58.26
2,550	232.96	420.41	610.97	-58.56
2,600	233.58	432.07	615.5	-58.85
2,650	234.16	443.77	619.96	-59.14
2,700	234.7	455.49	624.34	-59.43
2,750	235.2	467.23	628.65	-59.72
2,800	235.66	479.01	632.89	-60.01
2,850	236.08	490.8	637.07	-60.3
2,900	236.48	502.61	641.18	-60.58
2,950	236.84	514.45	645.22	-60.87
3,000	237.17	526.3	649.21	-61.15
3,050	237.48	538.16	653.13	-61.43
3,100	237.77	550.05	656.99	-61.71
3,150	238.03	561.94	660.8	-61.99
3,200	238.28	573.85	664.55	-62.27
3,250	238.5	585.77	668.25	-62.54
3,300	238.71	597.7	671.89	-62.81
3,350	238.91	609.64	675.48	-63.09
3,400	239.09	621.59	679.02	-63.36
3,450	239.27	633.55	682.51	-63.62
3,500	239.43	645.52	685.96	-63.89

Annexe 7:

Limites d Inflammabilités [93].

Gas or vapor ^a	In air (%)		In air (%)		In O ₂ (%)		In O ₂ (%)	
	Lower		Higher		Lower		Higher	
	M1	M2	M1	M2	M1	M2	M1	M2
<i>Inorganic</i>								
Hydrogen	4.0	4.0	75	75	–	4.0	94	–
Deuterium	–	5	–	75	–	5	–	95
Hydrazine	–	4.7	–	100	–	–	–	–
Hydrogen sulfide	–	4.3	–	45	–	–	–	–
Hydrogen cyanide	–	6	–	41	–	–	–	–
Cyanogen	–	6	–	32	–	–	–	–
Carbon disulfide	1.25	–	44	50	–	–	–	–
Carbon oxysulfide	–	–	–	–	–	–	–	–
Carbon monoxide	12.5	–	74	–	–	15.5	–	94
Chlorine monoxide	–	23.5	–	100	–	–	–	–
<i>Hydrocarbons</i>								
Methane	5.3	5.0	14	15	5.1	–	61	–
Ethane	3.0	–	12.5	15	3.0	–	66	–
Propane	2.2	–	9.5	–	2.3	–	55	–
Butane	1.9	–	8.5	–	1.8	–	49	–
Isobutane	1.8	–	8.4	–	1.8	–	48	–
Pentane	1.5	1.4	7.8	–	–	–	–	–
Isopentane	1.4	–	7.6	–	–	–	–	–
2,2-Dimethyl propane	1.4	–	7.5	–	–	–	–	–
Dimethyl butane	1.2	–	7.0	–	–	–	–	–
2-Methyl pentane	1.2	–	7.0	–	–	–	–	–
Heptane	1.2	1.1	6.7	–	–	–	–	–
2,3-Dimethyl pentane	1.1	–	6.7	–	–	–	–	–
Octane	1.0	–	–	–	–	–	–	–

¹H.F. Coward and G.W. Jones, "Limits of Flammability of Gases and Vapors," Bulletin 503, Bureau of Mines, (1952) US Government of Printing Office, Washington DC.

ANNEXES

Substance	MIE (mJ)	Ref.	Substance	MIE (mJ)	Ref.
Nitrostarch	40	3	Rubber (hard)	30	1
Nylon	20	1	SAN	30	3
	20–30	3	Shellac	10	1
Paper dust	20–60	3	Silicon	100	3
Paraformaldehyde	20	1	Soap	60	1
Pentaerythritol	10	1		60–120	3
Pentane	0.22	1	Soy flour	100–460	3
2-Pentane	0.18	1	Sugar	30	1
Petroleum ether (benzene)	0.25	3	Sulphur	15	1
			Tantalum	120	3
Phenol formaldehyde		3	Tetrafluoroethylene		3
Phosphorus (red)	0.2	1	Tetrahydrofuran	0.54	1
Phthalic anhydride	19–6000	1	Tetrahydropyran	0.32	1
PMMA	15–20	3	Thiophene	0.39	1
Polyacrylonitrile	20	3	Thorium	5	1
Polycarbonate	25	1	Tin	80	3
Polyethylene	10	1	Titanium	40	1
	70	3		25	3
Polyethylene teraphthalate	35	3	TNT	75	3
			Toluene	0.24	3
Ploypropylene	25–400	3	Trichloroethylene	295	3
Polystyrene	40–120	3	Triethyl amine	0.75	1
Polyvinyl acetate	160	3		1.15	3
			2,2,3-Trimethylbutane	1.0	1
Polyvinyl acetate alcohol	120	3	Uranium	45	1
			Urea formaldehyde	80–1280	3
Polyvinlyl butyral	10	3	Vanadium	60	3
Potato starch	20	1	Vinyl acetate	0.7	1
	25	3	Vinyl acetylene	0.082	1
Propane	0.25	1	Vinyl chloride	<0.3	2
	0.26	3	Wheat flour	50	1
Propene	0.28	2	Wheat starch	20	1
Propionaldehyde	0.4	2		25–60	3
Propylchloride	1.08	1	Wood bark	40–60	3
Propylene	0.28	1	Wood (filler)	20	1
Propylene oxide	0.13	1	Wood flour	30–40	3
	0.14	3	m-,o-,& p-xylene	0.2	3
Pyrethrum	80	3	Yeast	50	3
Rayon	240	3	Zinc	960	3
Rice	40	1	Zirconium	5	1
	40–120	3		15	3

Annexe 8:

Flash points for common Fuels [80].

Fuel	Formula	T_L (K) Closed	T_L (K) Open	T_b (K)	T_a (K)	$T_{f,ad}$ ^a (K)	LFL (%)	h_{fg} (kJ/g)	Q_c ^b (kJ/g)
Methane	CH ₄	–	–	111	910	2,226	5.3	0.59	50.2
Propane	C ₃ H ₈	–	169	231	723	2,334	2.2	0.43	46.4
n-Butane	C ₄ H ₁₀	–	213	273	561	2,270	1.9	0.39	45.9
n-Hexane	C ₆ H ₁₄	251	247	342	498	2,273	1.2	0.35	45.1
n-Heptane	C ₇ H ₁₆	269	–	371	533	2,274	1.2	0.32	44.9
n-Octane	C ₈ H ₁₈	286	–	398	479	2,275	0.8	0.3	44.8
n-Decane	C ₁₀ H ₂₂	317	–	447	474	2,277	0.6	0.28	44.6
Kerosene	≈C ₁₄ H ₃₀	322	–	505	533	–	0.6	0.29	44.0
Benzene	C ₆ H ₆	262	–	353	771	2,342	1.2	0.39	40.6
Toluene	C ₇ H ₈	277	280	383	753	2,344	1.3	0.36	41.0
Naphthalene	C ₁₀ H ₈	352	361	491	799	–	0.9	0.32	40.3
Methanol	CH ₃ OH	285	289	337	658	2,183	6.7	1.10	20.8
Ethanol	C ₂ H ₅ OH	286	295	351	636	2,144	3.3	0.84	27.8
n-Butanol	C ₄ H ₉ OH	302	316	390	616	2,262	11.3	0.62	36.1
Formaldehyde	CH ₂ O	366	–	370	703	2,334	7.0	0.83	18.7
Acetone	C ₃ H ₆ O	255	264	329	738	2,121	2.6	0.52	29.1
Gasoline	≈ C _{8,26}	228	–	306	644	–	1.4	0.34	44.1

T_L = flash point; $T_{H_{15,5}}$ autoignition; T_b = boiling point; $T_{f,ad}$ = adiabatic flame temperature;
LFL = lean flammability limit; h_{fg} = heat of vaporization; Q_c = heat of combustion

^a Based on stoichiometric combustion with air

^b Water and fuel in gaseous state