

SIMULATION NUMÉRIQUE DE LA DYNAMIQUE DES FRONTS DE FLAMME

Bruno Denet et Pierre Haldenwang

Différentes instabilités peuvent survenir lors de la propagation d'une flamme de prémélange et provoquer l'apparition de cellules sur un front initialement plan. Nous présenterons successivement l'instabilité thermodiffusive provoquée par la diffusion tangentielle de réactant, l'instabilité hydrodynamique provoquée par le saut de densité à la traversée de la flamme, et une instabilité paramétrique due au couplage entre la flamme et un champ acoustique. Ces effets sont étudiés à l'aide de simulations numériques directes des équations de conservation du milieu réactif.

Introduction

L'étude de la dynamique des fronts de flamme constitue un problème de base en combustion. Même dans le cas où l'on se limite aux flammes laminaires, c'est-à-dire n'interagissant pas avec un écoulement turbulent extérieur, une grande richesse de comportement peut être observée dans les expériences. Précisons tout d'abord que nous nous limiterons ici aux flammes de prémélange, c'est-à-dire au cas où les réactifs sont mélangés avant l'inflammation, par opposition aux flammes de diffusion, où la flamme sépare une zone contenant de l'oxygène d'une zone contenant un hydrocarbure ou tout autre type de carburant.

Dans le cas prémélangé, la flamme sépare au contraire une zone de gaz frais d'une zone de gaz brûlés produits par les réactions chimiques. On a coutume de parler de front de flamme à cause de l'épaisseur faible de cette zone de transition, à l'intérieur de laquelle la température varie fortement. La flamme convertit donc un état thermodynamiquement instable, mais métastable à température ambiante, les gaz frais, en un état thermodynamiquement plus stable, les gaz brûlés. La flamme de prémélange avance en direction des gaz frais pour effectuer cette transformation; c'est cette vitesse de flamme, différence essentielle avec la flamme de diffusion, qui est à la base de la physique du problème.

Evidemment, la cinétique chimique mise en jeu lors de la combustion d'un hydrocarbure s'avère complexe, puisqu'elle comporte plusieurs dizaines de réactions chimiques élémentaires. L'étude, aussi bien numérique qu'analytique des problèmes de chimie complexe, constitue un domaine très important de la combustion. Néanmoins, beaucoup de problèmes physiques caractéristiques des flammes peuvent être décrits au moins qualitativement à l'aide d'une chimie très simplifiée. Cette chimie se réduit à une seule réaction exothermique globale irréversible, ainsi qu'à l'étude d'une seule fraction massique, celle de l'espèce qui limite la réaction. C'est dans ce cadre que nous présenterons ici plusieurs simulations numériques de la dynamique des flammes de prémélange laminaires.

Quand on regarde les résultats d'expériences sur ces flammes, il est frappant de constater que dans la plupart des cas, le front ne reste pas plan, mais au contraire prend une forme plissée. Plusieurs explications de cette instabilité du front plan ont été avancées. Nous parlerons tout d'abord de l'instabilité thermodiffusive, due à l'effet déstabilisant de la diffusion de l'espèce limitante. Nous présenterons ensuite l'instabilité hydrodynamique dite de Darrieus-Landau, causée par le saut de densité à la traversée du front. Ce mécanisme d'instabilité est sans doute l'explication la plus convaincante des phénomènes observés expérimentalement. Finalement, nous parlerons d'une instabilité acoustique pouvant également conduire à la création de cellules sur le front.

L'instabilité thermodiffusive

Dans cette instabilité, on considère que ce sont les effets diffusifs qui déstabilisent le front plan, en conséquence de quoi l'on peut simplement négliger tout effet hydrodynamique. Nous dirons plus loin pourquoi une telle approximation nous semble douteuse, mais contentons-nous de dire pour le moment qu'avec la chimie simple précédemment évoquée, on arrive à un système de deux équations aux dérivées partielles couplées, dit modèle thermodiffusif (voir l'article de H. Berestycki et B. Larrouturou) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial t} &= \Delta T + \Omega, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} &= \frac{1}{Le} \Delta Y - \Omega, \\ \text{où } \Omega &= \frac{\beta^2}{2 Le} Y \exp\left(\frac{\beta(T-1)}{1+\gamma(T-1)}\right)\end{aligned}$$

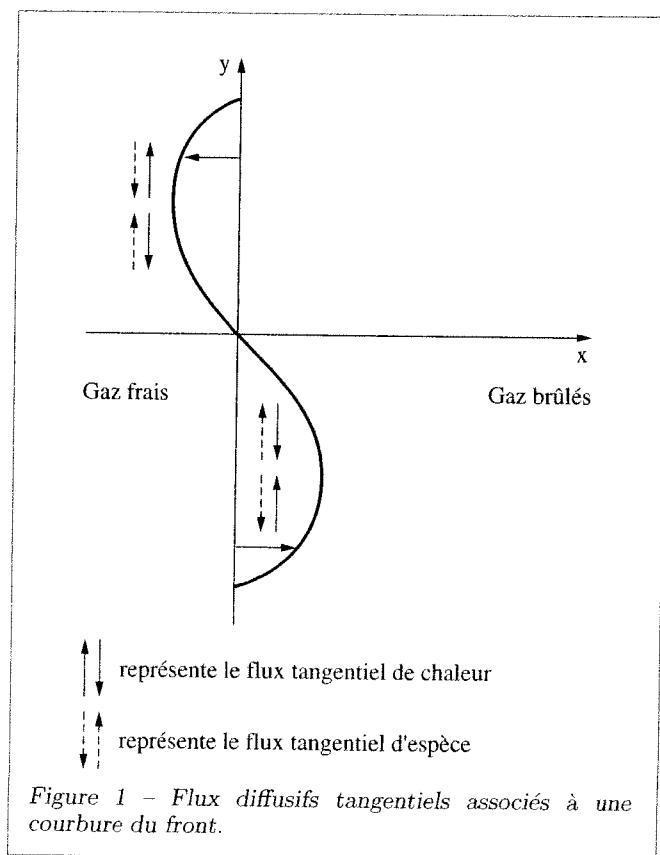
Dans ces équations, T et Y sont respectivement la température et la fraction massique de l'espèce limitante, normalisées pour varier entre 0 et 1 (T vaut 0 en $x = -\infty$ dans les gaz frais, 1 en $x = +\infty$ dans les gaz brûlés, alors

que Y varie de manière inverse : $Y = 1$ en $x = -\infty$ et $Y = 0$ en $x = +\infty$). β est le nombre de Zeldovich (énergie d'activation réduite), Le le nombre de Lewis, égal au rapport de la diffusivité thermique sur la diffusivité moléculaire ; $\gamma = \frac{(T_b - T_u)}{T_b}$ est un paramètre d'expansion

des gaz, T_u et T_b étant respectivement les températures des gaz frais et des gaz brûlés (avant normalisation). Le terme de réaction Ω n'est rien d'autre qu'une loi d'Arrhénius exprimée dans les variables T et Y .

Ce modèle thermodiffusif est relativement bien connu dans le domaine des mathématiques appliquées. En effet, ce modèle présente l'avantage d'être relativement simple, tout en contenant une grande richesse de comportements et plusieurs bifurcations intéressantes. Nous ne parlerons pas ici des instabilités oscillatoires qui se produisent dans ce modèle pour de grandes valeurs du nombre de Lewis, mais plutôt de l'instabilité thermodiffusive se produisant à bas Lewis.

Dans ce modèle, c'est en fait le flux diffusif tangentiel de concentration qui est déstabilisant pour le front plan, alors que le flux diffusif tangentiel de chaleur a au contraire une tendance stabilisante. En effet, considérons une flamme courbée (voir figure 1). Dans la partie de la flamme pointant vers les gaz frais, les flux de réactant tangentiels tendent à augmenter la concentration, donc la réaction : la flamme avance ainsi plus vite, ce qui tend à rendre la flamme de plus en plus courbée. Cet effet est contrebalancé par le flux de chaleur, qui au même endroit, tend à extraire l'énergie, donc à diminuer la réaction et la vitesse de flamme et à rendre la flamme plus plane.



Une étude linéaire de la stabilité du front plan a été menée par Sivashinsky. Les perturbations par rapport au front plan sont mises sous la forme $\exp(\sigma t + iky)$, où σ est le taux de croissance et k le vecteur d'onde, y étant la coordonnée transverse et t le temps. La relation de

dispersion $\sigma(k)$ a ainsi été obtenue dans la limite β grand et $l = \beta(Le - 1)$ d'ordre un. Pour des valeurs de l plus petites que -2, il y a instabilité, le taux de croissance pour des petits k s'écrivant

$$\sigma = -(1 + l/2)k^2 - 4k^4.$$

Présentons maintenant une simulation numérique du modèle thermodiffusif. Cette simulation est effectuée avec des conditions aux limites périodiques dans la direction transverse y , ce qui permet d'utiliser dans cette direction des méthodes «pseudo-spectrales» Fourier, connues pour leur efficacité. La simplicité des conditions aux limites dans la direction longitudinale x (T et Y varient de 0 à 1) nous a d'ailleurs permis dans ces simulations d'utiliser ces mêmes méthodes dans la direction x , après soustraction de certaines fonctions destinées à rendre T et Y périodiques dans cette direction.

Pour des valeurs du nombre de Lewis en dessous du seuil d'instabilité, on observe que pour des petites largeurs du domaine le front reste plan, ce qui est normal puisque le vecteur d'onde est alors trop grand pour se situer dans le domaine de vecteurs d'onde instables. En élargissant progressivement le domaine, on observe l'apparition d'une, puis de plusieurs cellules sur le front. Cette structure cellulaire est d'abord stationnaire, puis pour des largeurs plus grandes et des conditions initiales aléatoires, cette structure devient complètement chaotique.

Un exemple d'une telle structure est montré dans la figure 2. On peut voir ainsi l'évolution de la forme du front à plusieurs temps successifs : on observe de façon continue la naissance et la destruction de cellules sur le front. La création de cellules s'observe dans des zones relativement planes du front, ces zones devant être suffisamment larges pour qu'une longueur d'onde instable puisse pousser. En effet, rappelons que des longueurs d'onde trop petites ne sont pas instables. A l'inverse, des cellules trop petites ont donc tendance à fusionner, comme on peut le voir sur la figure 2. Cette fusion de plusieurs cellules peut se produire soit de manière symétrique, soit de manière antisymétrique. Dans ce dernier cas, une petite cellule est absorbée par une plus grande.

On trouve dans de nombreux articles l'affirmation selon laquelle l'instabilité thermodiffusive permet d'expliquer la formation de cellules observées dans les expériences. Cependant, il semble que cette affirmation soit dans la plupart des cas une erreur. En effet, l'instabilité thermodiffusive ne se produit qu'à de très faibles valeurs du nombre de Lewis, et est précédée par l'instabilité hydrodynamique, que nous décrirons plus loin. L'analyse menant à l'instabilité thermodiffusive néglige l'effet dominant, cause de l'instabilité hydrodynamique, qui est simplement que les flammes sont fortement exothermiques en général.

Il ne faudrait cependant pas croire que le modèle thermodiffusif soit sans intérêt. Il faut bien se rendre compte en effet que c'est sur ce modèle que les méthodes asymptotiques permettant de décrire les limites β grand et $l = \beta(Le - 1)$ d'ordre un ont été élaborées, avant d'être utilisées avec l'hydrodynamique. De même, il a été possible de comparer les prévisions théoriques aux simulations numériques de ce modèle, montrant un bon accord qualitatif. Cependant, d'un point de vue quantitatif, les résultats théoriques ne sont valides que pour de grandes valeurs du nombre de Zeldovich.

Les équations hydrodynamiques s'écrivent :

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) T = \Delta T + \Omega \quad (1.a)$$

$$\rho \frac{\partial Y}{\partial t} + \rho (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) Y = \frac{1}{Le} \Delta Y - \Omega \quad (1.b)$$

$$\Omega = \frac{\beta^2}{2 Le} Y \frac{\rho}{1 - \gamma} \exp \left(\frac{\beta (T - 1)}{1 + \gamma (T - 1)} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (3.a)$$

$$\frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\vec{\nabla} P + \rho \vec{G} + \mu \Delta \vec{v} + (\lambda + \mu / 3) \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \quad (3.b)$$

$$\rho = \left(1 + \frac{\gamma}{1 - \gamma} T \right)^{-1} \quad (4)$$

où l'on a repris les notations précédentes, auxquelles viennent s'ajouter la pression P , la gravité G , les viscosités de cisaillement et de volume μ et λ , toutes les quantités étant adimensionnées en unités d'épaisseur et de vitesse de flamme.

On a utilisé ici l'approximation isobare (valable à bas nombre de Mach), ce qui revient à considérer la pression comme constante dans l'équation d'état (4), qui est en fait l'équation des gaz parfaits écrite dans les variables T et ρ . Par contre, la pression intervient dans l'équation de Navier-Stokes (3.b) où elle permet que la contrainte imposée par l'équation de continuité (3.a) soit satisfaite.

Les simulations numériques que nous présenterons sont réalisées avec une discrétisation spatiale mixte de type «différences finies» dans le sens longitudinal x et Fourier dans le sens transverse y . On commence d'abord par résoudre les équations sur T et Y (1.a et 1.b), puis la densité ρ se déduit de l'équation d'état. A partir de là, on peut remarquer que la divergence de $\rho \vec{v}$ s'obtient par l'utilisation de l'équation de continuité. Il suffit alors d'utiliser cette relation en prenant la divergence de l'équation de Navier-Stokes pour obtenir une équation de Poisson sur la pression (i.e. laplacien de P = terme source). Il n'y a plus ensuite qu'à résoudre cette équation, reporter la pression dans l'équation de Navier-Stokes et résoudre pour obtenir la vitesse.

Comme dans le cas de l'instabilité thermodiffusive, on a pu obtenir (Pelcé et Clavin (1982)) le taux de croissance de l'instabilité hydrodynamique en fonction du vecteur d'onde. Cette analyse, valable dans la limite k petit, donne le taux de croissance σ comme solution d'une équation du second degré :

$$A(k)\sigma^2 + B(k)\sigma + C(k) = 0$$

où les coefficients A , B , C dépendent de l'expansion des gaz γ , de la gravité ainsi que des effets diffusifs. La racine la plus importante de cette équation du second degré (celle qui contrôle l'instabilité) est essentiellement de la forme :

$$\sigma = F + k - k^2$$

pour de petites valeurs de k , où F représente les effets de gravité : F est positif pour des flammes se propageant vers le bas, et nul en l'absence de gravité. Il nous a été possible de mesurer numériquement ce taux de croissance en fonction du vecteur d'onde et de le comparer aux prévisions théoriques. Comme on peut le voir sur la

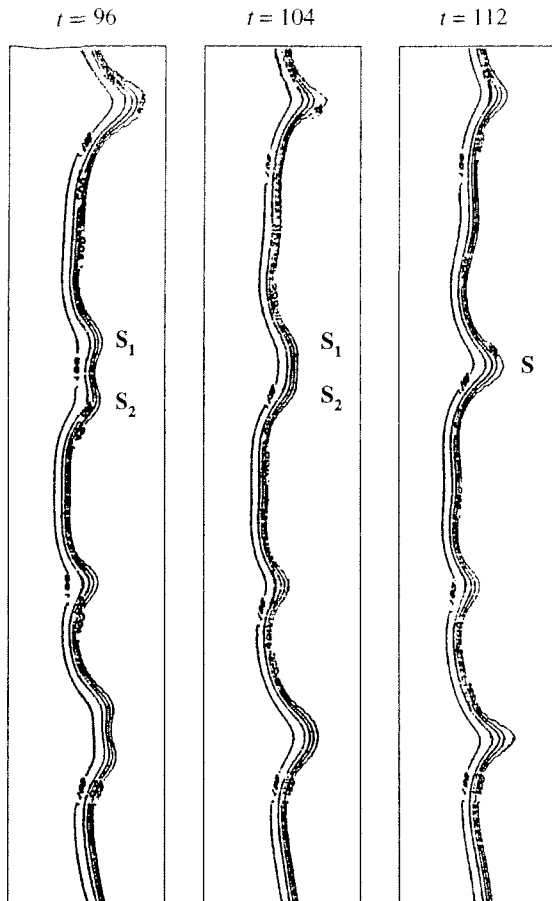


Figure 2 – Flamme chaotique produite par l'instabilité thermodiffusive.

L'instabilité hydrodynamique

La température des gaz brûlés étant typiquement 5 fois celle des gaz frais, la densité ρ des gaz brûlés est au contraire 5 fois plus faible, et comme à la traversée du front, on a conservation à la fois du flux massique ρv (v étant la vitesse) dans la direction normale au front et de la vitesse tangentielle, on aboutit au schéma de la figure 3, qui décrit ce qu'on appelle communément la déflexion des lignes de courant. C'est cet effet qui est à la base de l'instabilité hydrodynamique, dite aussi de Darrieus-Landau.

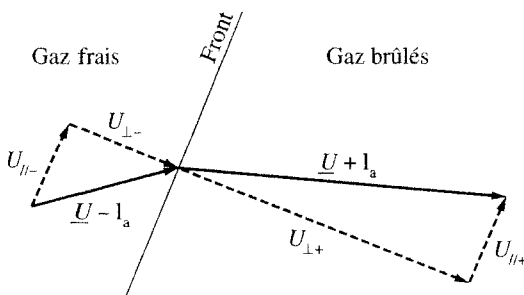


Figure 3 – Déflexion des lignes de courant à la traversée du front.

figure 4 pour un cas à gravité nulle, l'accord est bon pour des vecteurs d'onde petits.

Pour ce qui est des solutions non linéaires, l'instabilité hydrodynamique en l'absence de gravité possède la particularité de ne donner qu'une seule cellule dans la largeur du domaine de calcul, comme on le voit à la figure 5, où on a tracé à la fois les isothermes et les lignes

de courant. Sur cette figure, on peut voir facilement la déflexion des lignes de courant à la traversée de la flamme.

Dans le cas d'une flamme qui descend, la gravité stabilise les grandes longueurs d'onde, et provoque l'apparition pour une gravité suffisante d'une flamme cellulaire, comme sur la figure 6 (pour des gravités adimensionnées encore plus fortes, la flamme resterait plane).

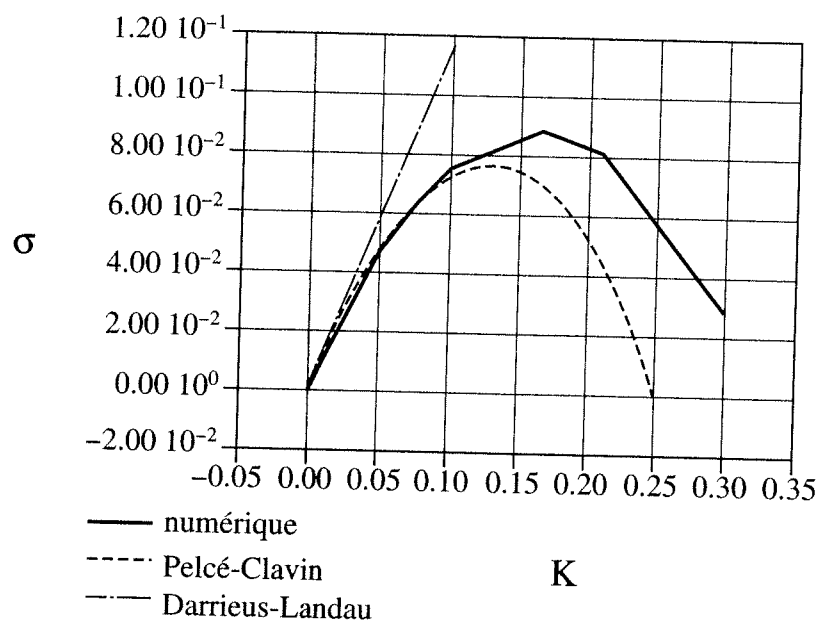


Figure 4 - Taux de croissance de l'instabilité hydrodynamique mesuré numériquement comparé aux prévisions théoriques modernes (Pelcé-Clavin) et aux prévisions théoriques des années 40 (Darrieus-Landau).

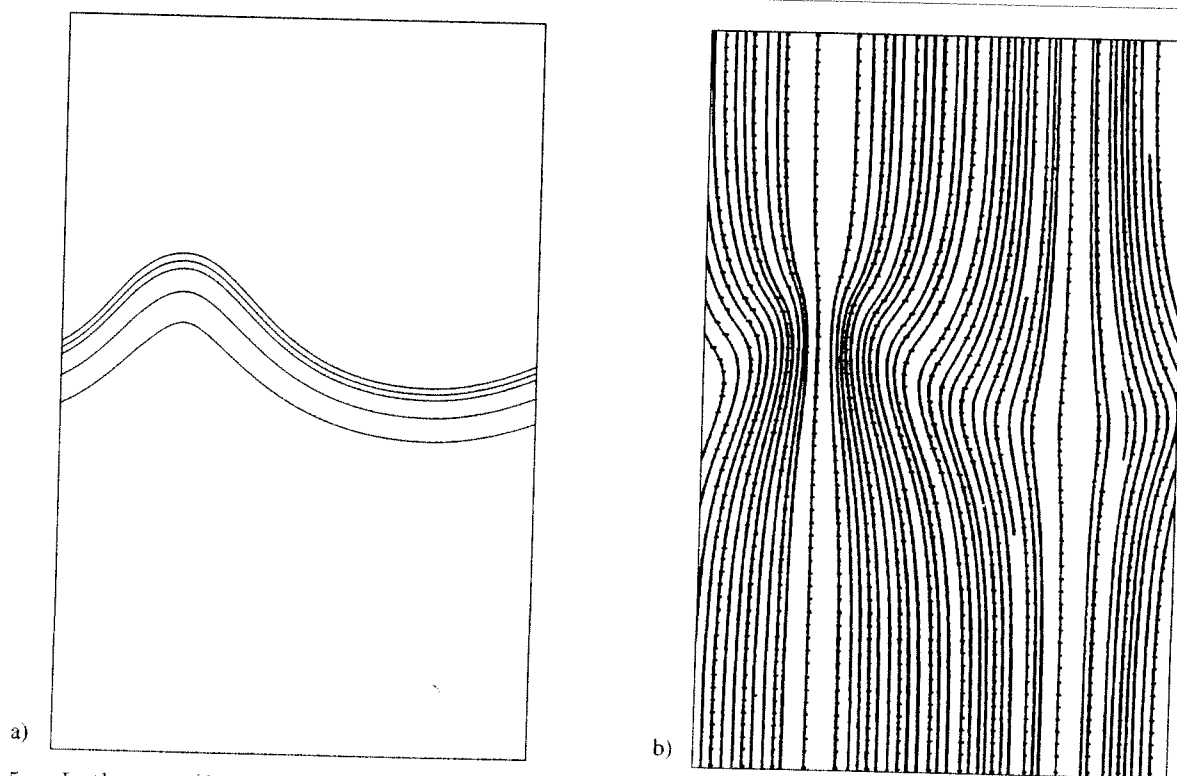


Figure 5 - Isothermes (figure 5a) et lignes de courant (figure 5b) d'une flamme courbée produite par l'instabilité hydrodynamique en l'absence de gravité.



Figure 6 - Isothermes d'une flamme cellulaire descendante produite par l'instabilité hydrodynamique en présence de gravité.

L'instabilité paramétrique acoustique

On a constaté depuis plus d'un siècle que la propagation d'une flamme de prémélange dans un tube suffisamment long produisait du son (il s'agit en fait de basses fréquences de l'ordre de quelques dizaines de Hertz). Markstein a expliqué ce phénomène par un couplage entre le champ acoustique et la forme du front de flamme. L'acoustique influence la flamme par un mécanisme que nous allons détailler dans la suite, mais la flamme peut également amplifier le champ acoustique si la pression acoustique et le dégagement de chaleur sont en phase (ce critère est connu sous le nom de critère de Rayleigh).

On peut expérimentalement (Searby et Rochwerger (1991)) bloquer cette amplification en stabilisant la flamme près d'un noeud de pression (i.e. à une position dans le tube où la pression acoustique est nulle). Ceci peut être fait en envoyant sur la flamme un flux de gaz frais réglable. Dans ces conditions, on est ramené au problème d'une flamme dans une acoustique imposée.

Comme la longueur d'onde acoustique est très grande devant la largeur de la flamme et que l'acoustique dans un tube long est pratiquement monodimensionnelle (indépendante de la coordonnée transverse), on peut finalement considérer que l'acoustique n'affecte la flamme qu'en provoquant une accélération dépendant du temps, qu'on pourra simplement ajouter à l'accélération due à la gravité, pour obtenir $G(t) = gd/u_f^2 - \omega u \cos(\omega t)$ pour la gravité adimensionnée, où ω et u sont respectivement la pulsation et l'amplitude acoustiques.

Dans la section précédente sur l'instabilité hydrodynamique, nous avons indiqué que les taux de croissance sont solutions d'une équation du second degré dont les coefficients dépendent notamment de la gravité (en fait seul le dernier coefficient $C(k)$ en dépend). Cette variation de la gravité avec le temps constitue donc un forçage paramétrique du problème. Il y a là une analogie avec le problème classique d'un pendule constitué d'une masse accrochée à une tige rigide, dont on fait varier la fréquence propre avec le temps, par exemple en faisant subir une accélération au point d'attache, qui s'ajoute à la gravité. Un tel forçage paramétrique, décrit analytiquement par une équation de Mathieu, possède la propriété bien connue de pouvoir déstabiliser l'équilibre stable correspondant à la position la plus basse du pendule (c'est le

principe de base de la balançoire). Mais cela peut également restabiliser l'équilibre instable correspondant à la position la plus haute du pendule.

Dans le cas de la flamme, l'équation du second degré correspond à un pendule (avec frottement) instable à cause de l'instabilité hydrodynamique, et le forçage paramétrique peut donc pour des amplitudes suffisantes, restabiliser la flamme plane comme on peut le voir sur la figure 7 (Denet et Toma (1995) à paraître). Si l'on augmente encore l'amplitude, on assiste à la création de petites cellules sur le front. Ces cellules oscillent avec deux fois la période du forçage, comme on peut le voir sur la figure 8, qui montre la position du front à deux instants différents d'une période de forçage : les deux dessins sont en opposition de phase.

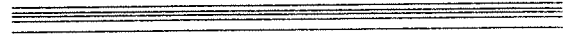


Figure 7 - Flamme plane restabilisée par un forçage paramétrique d'amplitude moyenne.

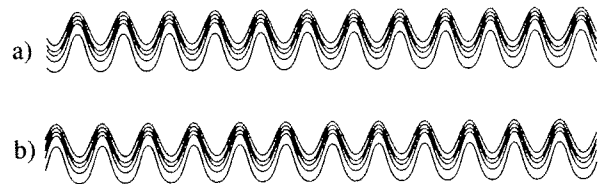


Figure 8(a b) - Flamme excitée par un forçage paramétrique d'amplitude grande pour deux temps différant d'une période de forçage : on voit que les deux flammes sont en opposition de phase.

Conclusion

Nous avons présenté ici plusieurs mécanismes permettant à une flamme de prémélange de s'écarter de la forme plane. Parmi ces différentes explications, l'instabilité thermomodiffusive possède des propriétés mathématiques de mieux en mieux connues, mais est sans doute moins réaliste que la seconde explication, basée sur l'hydrodynamique. Le dernier paragraphe nous a par ailleurs permis de montrer qu'un forçage paramétrique des équations hydrodynamiques était capable de reproduire des résultats d'expériences d'interaction entre flamme et acoustique. Beaucoup d'idées de base sur les sujets présentés ici viennent des travaux pionniers de Markstein, qu'on pourra trouver dans la bibliographie ci-dessous.

Pour en savoir plus

- Sivashinsky (G.I.), *Combust. Sci. Tech.*, **15**, p. 137, 1977.
- Denet (B.), Haldenwang (P.), *Combust. Sci. Tech.*, **86**, p. 199, 1992.
- Markstein (G.H.), *Non steady flame propagation*, Pergamon Press Ed, 1964.
- Clavin (P.), *Prog. Energy Combust. Sci.*, **11**, p. 1, 1985.
- Pelcé (P.), Clavin (P.), *J. Fluid Mech.*, **124**, p. 219, 1982.
- Denet (B.), Haldenwang (P.), *Combust. Sci. Tech.*, **104**, p. 143, 1995.
- Markstein (G.H.), *Fourth Symposium in Combustion*, p. 44, Williams and Wilkins, 1953.
- Searby (G.), Rochwerger (D.), *J. Fluid Mech.*, **231**, p. 529, 1991.
- Voir aussi l'article de Guy Joulin dans ce même numéro sur des équations réduites décrivant les phénomènes présentés ci-dessus.



Monsù Desiderio, Asa, roi de Juda détruisant les idoles.
Reproduction by permission of the Syndics of the Fitzwilliam Museum, Cambridge.