



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par l'INPT

Discipline ou spécialité : Dynamique des Fluides

Présentée et soutenue par

Yannick DHUÉ

Le 23 Septembre 2009

Etude numérique et expérimentale de l'influence de l'humidité de l'air sur la combustion. Application aux stratégies de réduction d'émissions polluantes et de consommation des moteurs à pistons.

JURY

G. BRUNEAUX	Ingénieur recherche à l'IFP, Paris	Rapporteur
B. RENO	Professeur à l'INSA, Rouen	Rapporteur
D. ESCUDIE	Directrice de recherche à l'INSA, Lyon	Examineur
C. MOUNAIM-ROUSSEL	Professeur à Polytech'Orléans	Examineur
B. PATISSIER	Directeur Marketing à Measurement Specialties / Humirel (France)	Examineur
T. POINSOT	Directeur de recherche CNRS, Toulouse	Directeur de thèse
B. FERRET	Maitre de conférences UPS, Toulouse 3	Co-directeur de thèse

Ecole doctorale : MEGEP

Unité de recherche : Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

Directeur(s) de Thèse : Thierry POINSOT et Bernard FERRET

Remerciements

Ces années de thèse passées à l'IMFT m'ont beaucoup apporté à plusieurs niveaux, tant sur le plan professionnel que sur le plan humain. Je tiens à remercier ici toutes les personnes qui ont contribué à cette expérience.

Je souhaite tout d'abord remercier l'ensemble des membres du jury : Christine Mounaim-Rouselle pour avoir présidé ce jury, Bruno Renou et Gilles Bruneaux pour avoir accepté d'être les rapporteurs de cette thèse, ainsi que Dany Escudié pour avoir accepté de faire partie de ce jury.

J'exprime aussi mes remerciements à Jean-François Allier, directeur, et Bruno Patissier, directeur commercial, de la société Measurement Spécialties Toulouse, d'avoir eu confiance en moi et d'avoir élaboré cette thèse en partenariat avec l'IMFT.

Je remercie aussi mon directeur de thèse Thierry Poinot de m'avoir encadré pendant ces années de thèse. Et bien sûr Bernard Ferret, mon co-directeur de thèse, qui a permis à cette thèse de se réaliser et d'arriver à bon terme, mais aussi d'avoir eu confiance en moi dès le départ et de m'avoir soutenu du début à la fin.

Je tiens aussi à remercier les deux directeurs du groupe Ecoulements Et Combustion, à savoir l'actuel « Chef » : Olivier Simonin pour sa présence et sa bonne joie de vivre. Ainsi que l'ancien directeur de groupe, à savoir Georges Charnay qui sans lui cette thèse n'aurait pas pu se faire.

Je remercie aussi les membres permanents du groupe EEC : SuperFlo pour sa présence et son soutien. Elle va trouver son bureau un plus tranquille maintenant que je ne serai plus là pour aller la taquiner. C'est surtout son « chef » qui va trouver le bureau de Florence bizarrement plus calme et silencieux. Le Gégé qui a été là et de bon conseil durant toute ma thèse. Et qui durant toute ma thèse a dit « je change ma 306 » et qui a encore sa 306. Moïse (à prononcer sans le trémat !) pour sa bonne humeur quotidienne (sans exception !) et auquel j'attends toujours ces fameux acras de morue dont beaucoup de monde me parle. Benoit pour les échanges, discussions scientifiques, et pour le travail qu'il a initié sur la suite de mes travaux de thèse. Laurent pour sa « déconne » quotidienne et son fervent esprit à défendre une cause perdue. . . Les MACs ! Pascal, mon collègue de bureau, lui aussi fervent défenseur d'une cause perdue : l'OM. Mais en tant que Marseillais beaucoup de monde lui « pardonne » cette dévotion et l'invite à prendre (sans se faire prier) un Ricard, sa deuxième passion de Marseillais ! Jean-Luc curieusement toujours présent aux

pots même s'ils ont lieu un autre jour que le vendredi, seul jour où il est « normalement » présent. Et les autres bien sûr Annaïg, Hervé, Rudy, Eric, Olivier P.

Mais comment ne pas remercier aussi ceux que j'ai côtoyé quotidiennement durant ces années de thèse à savoir les doctorants, qui pour certains sont devenus plus que des collègues de travail. Un grand merci donc à Virginie qui a toujours été là pour moi, notamment pour les pauses thé (trop sucré dira t'elle). FloFlo le faux calme, qui est toujours là à vouloir essayer de prendre le dessus sans jamais pour autant avoir réussi, mais aussi pour avoir toujours trouvé des excuses (pas toujours très valables) lorsqu'il perdait au squash. Magali pour m'avoir montré ce que c'est de n'avoir pas de chance (je n'ai pas dis deux mains gauches...). Nicolix le breton (je n'ai pas dis ventre sur pattes...) pour m'avoir fait connaître des produits bien de chez lui, en particulier son jus de pomme! JF pour... être JF! Enrica la Belle et Jeune Italienne pour beaucoup de choses, pour sa délicieuse cuisine italienne en autre (qui a dit surtout??). Mais aussi tous les autres : Brice, Anthony, Arthur, Xavier, Dirk, Zafer, Ali, Gêrôme, Mariyana, Laïa, Olivier K, Nicolas N, Marion P, Aurélien, Medhi, Emma, David, Julie, Pauline, Marie...

Je tiens à remercier tous les « larbins » pardon stagiaires (excusez moi du lapsus...) qui ont participé à ce travail, un grand merci donc à Aymeric, Fabien, Pierre et Dimitri. Mais aussi tous les autres stagiaires que j'ai pu côtoyer durant ces années de thèse et plus particulièrement à Rososo (le chevauteur de monture italienne), Marion L et Katy.

Et je tiens aussi à remercier les personnes qui ont permis de réaliser cette thèse dans de bonnes conditions à savoir Bruno de... c'est une bonne question (je ne l'ai jamais vu bosser aussi loin que je me souviens...), Muriel de la repro, Yannick et Gilles de l'informatique, Catherine de la communication, Sébastien et Hervé de Signaux et Images, Jean-Marc, Laurent et Jean-Pierre de l'atelier.

Un merci aussi à tous ceux qui m'ont encouragé de près ou de loin durant cette thèse à savoir Christophe et Damien, mais aussi les ex-Déodatiens et les GaronnaQuad!

Et bien sur, je dirais même le plus important, je tiens à remercier mes parents, ma soeur, mon beau-frère ainsi que le petit dernier de la famille Matthias pour leur présence et leur soutien tout au long de ces années de thèse.

Résumé

Les moteurs à pistons utilisent en général l'air ambiant comme comburant. Cet air est composé principalement d'azote et d'oxygène mais aussi de vapeur d'eau. La présence de cette vapeur modifie le processus de combustion de façon plus ou moins significative. S'agissant des moteurs, l'addition d'eau modifie les performances et diminue les émissions d'oxydes d'azote. Cependant très peu de travaux traitent de ces effets. Ce travail a donc pour objectif d'étudier expérimentalement et numériquement l'influence de l'humidité de l'air sur la combustion et plus particulièrement sur le fonctionnement des moteurs à pistons.

L'approche numérique, menée de front avec l'approche expérimentale, modélise une flamme laminaire de prémélange. L'outil numérique qui a été utilisé est le logiciel de calcul de cinétique chimique COSILAB[®] pour du méthane et de l'isooctane. L'approche expérimentale utilise deux bancs d'essais. Le premier banc est un brûleur bec Bunsen à fente qui a été entièrement conçu et validé au cours de cette étude afin de mesurer des vitesses de flamme laminaire. Une attention particulière a été portée à la métrologie et à l'estimation quantitative des incertitudes de mesures. Ces mesures obtenues à pression atmosphérique sur ce brûleur, pour une humidité spécifique pouvant atteindre 80 g.kg^{-1} , ont permis de valider les résultats obtenus numériquement. Les calculs ont ensuite été portés à des conditions de pression et température représentatives d'un fonctionnement moteur. Un banc d'essai moteur recherche a été utilisé pour confirmer les tendances observées dans le cas des flammes laminaires.

Les résultats obtenus montrent une forte diminution de la vitesse de flamme ainsi que des émissions d'oxydes d'azote lorsque l'humidité augmente. Par exemple pour une humidité spécifique de 110 g.kg^{-1} , la vitesse de flamme chute de 55% et les émissions de NO_x chutent de 70%. Les essais au banc moteur ont montré une augmentation de l'avance à l'allumage optimale et des émissions d'hydrocarbures imbrûlés lorsque l'humidité augmente. Ils confirment également la forte diminution des émissions d'oxydes d'azote ; par exemple pour une augmentation de l'humidité de 30 g.kg^{-1} , les NO_x baissent de 35%.

Mots clefs : Combustion, Méthane, Moteur à piston, Flamme laminaire, Polluants, Brûleur Bunsen, Humidité.

Table des matières

Nomenclature	11
Introduction	15
Contexte	15
Effet de la vapeur d'eau sur la combustion dans les moteurs à piston	16
Mesures de vitesses de flammes laminaires prémélangées	20
Organisation du manuscrit	23
1 Les outils utilisés pour étudier les effets de H₂O sur une flamme laminaire prémélangée	25
1.1 Introduction	25
1.2 Les outils numériques	25
1.2.1 Rappel théorique de combustion	26
1.2.2 Calcul 0D : EQUIL	28
1.2.3 Calcul 1D	29
1.2.4 Les schémas cinétiques	30
1.2.4.1 Cas du méthane : GRI-Mech 3.0	30
1.2.4.2 Cas de l'isooctane : schéma de Hasse	30
1.2.5 Détermination des NO _x	31
1.3 Mesure expérimentale de vitesse de flamme laminaire	32
1.3.1 Introduction	32
1.3.2 Une expérimentation bidimensionnelle laminaire	35
1.3.2.1 Le brûleur	35
1.3.2.2 Instrumentation du banc expérimental	38
1.3.2.3 Dispositifs de sécurité	39
1.3.2.4 Débitmétrie	41
1.3.3 Mesure de la surface de flamme	48
1.3.3.1 Méthode de mesure et limitations	48
1.3.3.2 Formulation de la surface de flamme	51
1.3.3.3 Validation de la méthode de calcul	52

1.3.4	Suppression des instabilités de combustion	53
1.3.5	Evaluation des marges d'erreurs	56
1.3.5.1	Evaluation théorique de l'effet de l'étirement	56
1.3.5.2	Evaluation expérimentale de l'effet de l'étirement	58
1.3.5.3	Erreurs de mesure	59
1.3.6	Caractérisation du champ de vitesse en sortie de fente	63
1.3.6.1	Méthode de mesure	64
1.3.6.2	Profil de vitesse	64
1.3.6.3	Contrôle de la débitmétrie	66
1.3.7	Evaluation a posteriori de la précision des mesures et choix du paramètre de correction η	67
2	Les effets de H₂O sur une flamme laminaire prémélangée	71
2.1	Définition de la gamme d'humidité	71
2.2	Etude expérimentale et numérique des effets de H ₂ O sur la vitesse de flamme à 1 bar	74
2.2.1	Température des gaz frais 300 K	74
2.2.2	Température des gaz frais 330 K	76
2.3	Etude numérique de l'effet de H ₂ O à 1 bar et 300 K	77
2.3.1	Vitesse de flamme laminaire prémélangée	78
2.3.2	Température adiabatique de fin de combustion	78
2.3.3	Oxydes d'azote	81
2.3.4	Monoxyde de carbone	82
2.3.5	Hydrocarbures imbrûlés - Cas du méthane	83
2.4	Etude numérique de l'effet de H ₂ O à 1 bar et à température des gaz frais variable . .	86
2.4.1	Vitesse de flamme laminaire	86
2.4.2	Température adiabatique de fin de combustion	87
2.4.3	Produits de combustion	90
2.4.3.1	Oxydes d'azote	90
2.4.3.2	Monoxyde de carbone	90
2.4.3.3	Hydrocarbures imbrûlés	91
2.5	Etude numérique de l'effet de H ₂ O lors d'une compression isentropique	94
2.5.1	Modélisation de la compression	94
2.5.2	Vitesse de flamme laminaire	95
2.5.3	Température adiabatique de fin de combustion	95
2.5.4	Produits de la combustion	98
2.5.4.1	Oxydes d'azotes	98
2.5.4.2	Monoxyde de carbone	98
2.5.4.3	Hydrocarbures imbrûlés	99

2.6	Conclusion sur les flammes laminaires prémélangées	102
3	Les effets de H₂O sur le fonctionnement d'un moteur à piston	103
3.1	Les moteurs à allumage commandé	104
3.1.1	Description	104
3.1.2	Fonctionnement	105
3.2	Le dispositif expérimental	107
3.2.1	Le moteur	108
3.2.2	Système d'humidification	109
3.2.3	Capteurs et appareils de mesure	112
3.2.3.1	Banc d'essai	112
3.2.3.2	Pression cylindre	112
3.2.3.3	Capteur d'humidité	112
3.2.3.4	Analyseurs de gaz	113
3.2.3.5	Acquisition et procédure expérimentale	114
3.3	Résultats expérimentaux	115
3.3.1	Performances moteur	117
3.3.1.1	Avance à l'allumage	117
3.3.1.2	Pression cylindre maximale	119
3.3.1.3	Couple moteur	120
3.3.2	Émissions polluantes	123
3.3.2.1	Oxydes d'azote	123
3.3.2.2	Hydrocarbures imbrûlés	123
3.3.2.3	Monoxyde de carbone	124
3.4	Conclusion	127
	Conclusion	129
	Bibliographie	131
	A Article	139
	B Schéma cinétique pour le méthane : GRI-Mech 3.0	151
	C Schéma cinétique pour l'isooctane : le schéma de Hasse	152

Nomenclature

Symbole	Désignation	Unité
β_j	Exposant de température de la loi d'Arrhénius	
δ_L^0	Épaisseur de flamme laminaire	[m]
η	Coefficient de correction	
ρ	Masse volumique	[kg.m ⁻³]
ρ_k	Masse volumique de l'espèce k	[kg.m ⁻³]
κ	Étirement du front de flamme	
ϕ	Richesse	
σ_{ij}	Tenseur des contraintes	[kg.m ⁻¹ .s ²]
Σ_f	Surface de la flamme	[m ²]
Σ_{mesure}	Surface de la flamme mesurée	[m ²]
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses	
$\dot{\omega}_k$	Taux de production de l'espèce k	[kg.m ⁻³ .s]
$\dot{\omega}_{kj}$	Taux de production de l'espèce k par la réaction j	[kg.m ⁻³ .s]
ν'_F	Coefficient stœchiométrique du carburant	
ν_{kj}	Coefficient stœchiométrique généralisé de l'espèce k dans la réaction j	
ν'_{kj}, ν''_{kj}	Coefficient stœchiométrique de l'espèce k dans la réaction j	
ν'_O	Coefficient stœchiométrique de l'oxydant	
A_{Coupe}	Aire de la section de flamme	[m ²]
A_f	Aire de la fente	[m ²]
$A_{f,j}$	Constante préexponentielle de la loi d'Arrhénius	
C_p	Capacité calorifique	[J.K ⁻¹ .mol ⁻¹]
C_{pk}	Capacité calorifique de l'espèce k	[J.K ⁻¹ .mol ⁻¹]
E_j	Énergie d'activation de la loi d'Arrhénius	
H	Hauteur de la flamme	[m]
H_a	Humidité absolue	[gH ₂ O.kg ⁻¹ _{airsec}]

Symbole	Désignation	Unité
H_k	Enthalpie de l'espèce k	
H_r	Humidité relative	[%]
K_{f_j}	Taux de réaction j	
K_j	Constante d'équilibre de la réaction j	
K_{r_j}	Taux inverse de la réaction j	
l_f	Largeur de la fente	[m]
\mathcal{L}	Longueur de Markstein	
Le_F	Nombre de Lewis	
L_f	Longueur de la fente	[m]
L_{Flamme}	Longueur du front de flamme de la vue de coupe	[m]
M_a^c	Nombre de Markstein	
m_k	Masse de l'espèce k	[kg]
\dot{m}_k	Débit massique de l'espèce k	[kg.s ⁻¹]
\dot{m}_k^v	Débit volumique de l'espèce k	[m ³ .s ⁻¹]
N	Nombre de mole	[mol]
n_k	Nombre de mole de l'espèce k	[mol]
$n_{\text{H}_2\text{O}}$	Rapport des fractions molaire d'eau et d'oxygène	
P	Pression	[Pa]
p_k	Pression partielle de l'espèce k	[Pa]
$P_{\text{sat}}(T)$	Pression de vapeur saturante de l'eau à la température T	[Pa]
Q_j	Taux de progression de la réaction j	[mol.m ⁻³ .s ⁻¹]
R	Constante des gaz parfaits : $R = 8,314$	[J.mol ⁻¹ .K ⁻¹]
r_k	Constante du gaz de l'espèce k	[J.kg ⁻¹ .K ⁻¹]
\mathcal{R}	Rayon de courbure du front de flamme	[m]
s	Rapport stœchiométrique	
s_c	Vitesse de consommation de la flamme	
S_L	Vitesse de flamme laminaire	[m.s ⁻¹]
s_L^0	Vitesse de flamme non étirée	[m.s ⁻¹]
s_H	Humidité spécifique	[gH ₂ O.kg _{air} ⁻¹]
T	Température	[K]
T_{adiab}	Température adiabatique de fin de combustion	[K]
T_{gf}	Température des gaz frais	[K]
U	Vitesse moyenne des gaz en sortie de buse	[m.s ⁻¹]
V	Volume	[m ³]

Symbole	Désignation	Unité
V_i^c	Correction de vitesse dans l'approximation de Hirschfelder et Curtiss	[m.s ⁻¹]
V_{ki}	Correction de vitesse	[m.s ⁻¹]
W_k	Masse molaire de l'espèce k	[kg.mol ⁻¹]
X_k	Fraction molaire de l'espèce k	
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	

Introduction

Contexte

La propagation de fronts de flamme dans un milieu prémélangé est un des phénomènes de base en combustion : c'est un des seuls vrais problèmes génériques où une solution ne dépendant que de l'espace peut être développée à l'aide de méthodes théoriques. C'est aussi un prototype d'étude représentatif de nombreuses applications industrielles : suivant la théorie largement répandue des flammes [5, 70, 74, 94], la propagation des fronts de flamme laminaire contrôle la vitesse de combustion de la plupart des systèmes industriels. Étudié depuis plus de deux siècles, ce mécanisme contrôle aussi bien les déflagrations (et donc leur application dans les moteurs à piston et de nombreux brûleurs industriels) que les détonations (et donc dans les explosions accidentelles ou dans les bombes). Aujourd'hui encore, être capable de prévoir la vitesse et la structure d'un front de flamme se propageant dans un milieu prémélangé reste une nécessité dans de nombreuses applications et un challenge scientifique pas nécessairement maîtrisé. En effet, s'il est clair que la vitesse d'une flamme prémélangée est une grandeur bien définie, être capable d'imaginer des dispositifs pour mesurer cette vitesse dans des conditions idéales reste d'une grande difficulté pratique.

Le cadre de cette thèse est la combustion dans les moteurs à piston et plus particulièrement l'effet de la vapeur d'eau sur la combustion dans les moteurs, donc dans le cadre limité des déflagrations. La brique de base dans une telle étude est la propagation du front dans un mélange de carburant, d'air et de vapeur d'eau additionnelle. Cette vapeur d'eau peut être celle qui est présente dans l'air avalé par le moteur. Elle peut être aussi celle ajoutée à cet air par l'introduction de gaz recirculés (EGR¹) qui est une méthode très généralement employée dans les moteurs pour réduire les polluants. Quelle qu'en soit la source, connaître l'effet de cette vapeur d'eau sur la vitesse de propagation de la flamme, sur sa structure et sur les polluants émis par le front de réaction est une nécessité pour comprendre l'effet de l'eau dans un moteur. Une fois cet effet compris, il doit être combiné à d'autres études pour prévoir la combustion dans un moteur. En effet, la propagation laminaire d'un front de flamme est affectée par de nombreux autres

¹Recirculation des gaz brûlés (Exhaust Gas Recirculation)

effets dans un moteur. Le premier de ces effets est l'influence de la turbulence et le fait qu'un mélange carburant/air/eau ne sera pas affecté de la même façon par la turbulence qu'un mélange carburant/air sec.

Au cours de cette thèse, nous aborderons deux aspects de la combustion dans un moteur avec addition de vapeur d'eau :

- On étudiera tout d'abord la propagation laminaire en construisant une expérimentation et en effectuant des simulations numériques de l'effet d'eau sur la vitesse de flammes laminaires prémélangées. L'expérimentation a été conçue et développée entièrement pendant cette thèse.
- On étudiera ensuite l'effet de l'addition d'eau dans un moteur réel à quatre cylindres sur un banc installé à l'IMFT.

Cette introduction décrit tout d'abord le contexte industriel de cette thèse CIFRE en expliquant pourquoi l'eau est un paramètre important et trop souvent ignoré en contrôle moteur. On rappellera aussi les études les plus récentes sur l'effet de l'eau dans les moteurs à piston. Puis on abordera la déclinaison 'recherche' de ce besoin industriel en expliquant comment mesurer des vitesses de flamme laminaire. Enfin on présentera le plan de la thèse et son organisation.

Effet de la vapeur d'eau sur la combustion dans les moteurs à piston

L'introduction d'eau dans des systèmes de combustion peut sembler étrange aux néophytes puisque c'est aussi le moyen d'éteindre les flammes. Ceci n'est vrai que lorsque l'on introduit de grandes quantités d'eau. Pour de faibles quantités d'eau ajoutée, les flammes survivent bien à l'addition d'eau et le premier effet de cette addition est la modification des performances du moteur, ainsi qu'une diminution des émissions d'oxydes d'azote. Ce procédé largement employé dans les turbines à gaz permet par exemple de réduire l'émission de NO_x d'un facteur allant de 3 à 8 suivant la température adiabatique de fin de combustion pour une teneur en masse de 15% de vapeur d'eau dans l'air [4]. Les turbines à gaz utilisant une injection d'eau sont appelées « HAT » pour Humid Air Turbine. Ce type de turbine permet aussi d'augmenter le rendement du cycle ainsi que le travail spécifique de la turbine [31]. Gallo a aussi montré que cette augmentation de rendement et de travail spécifique est accentuée lors de l'augmentation de la pression de compression.

Dans le monde des moteurs à piston, la quantité d'eau introduite dans le moteur n'est pas contrôlée puisque l'air entrant par l'admission peut être sec ou humide. Dans un pays tropical à 50 degrés Celsius, la fraction massique d'eau dans un air totalement saturé en vapeur d'eau peut atteindre 0,08. De plus, si on fait recirculer des gaz brûlés dans l'admission, il est alors possible de monter à des fractions massiques en eau bien plus élevées. Il est intéressant de constater que

la charge en eau de l'air entrant dans le moteur est rarement prise en compte, entre autres parce qu'elle n'est pas mesurée. Les codes de calcul pour les moteurs à piston, utilisés aujourd'hui par tous les constructeurs automobiles par exemple, ne considèrent la combustion que dans un air sec. Or nous montrerons que les caractéristiques de la combustion peuvent être affectées de façon importante (par exemple la vitesse de flamme peut baisser d'un facteur deux) de telle sorte qu'il paraît naturel d'inclure les effets de l'eau dans ces codes dans le futur.

L'idée de s'intéresser à l'effet de l'eau, sous forme liquide ou gazeuse, dans les moteurs n'est pas récente. Déjà en 1913, Hopkinson [40] disait que « l'idée d'introduire de l'eau dans les moteurs à combustion interne n'est pas nouvelle ». C'est ensuite durant la seconde guerre mondiale que l'ajout d'eau dans les moteurs refait son apparition à bord des avions P-47D (Fig. 1) équipé du moteur R-2800-59 avec une injection de mélange eau-méthanol permettant un accroissement de puissance (environ 300 cv) sur de courtes durées pouvant faire la différence durant les manœuvres de combats. Ce n'est que dans les années 70-80 que l'ajout d'eau dans les moteurs à combustion interne connaît un regain d'intérêt. Un des premiers travaux à remettre en avant cette technique est dû à Dryer en 1976 [25] qui s'intéressait au concept de la combustion d'une émulsion composée d'eau et de fuel et envisagea ainsi de « futures » applications possibles avec cette technique. D'autres travaux antérieurs à Dryer ont traité l'effet de l'eau sur la combustion, mais abordent uniquement l'effet de l'eau sur les émissions d'oxydes d'azote dans les turbomachines. Marchionna [59] montre une dépendance des émissions d'oxydes d'azote vis à vis de l'humidité de l'air à l'entrée d'une turbine à gaz avec la relation suivante :

$$NO_X = NO_{X_0} e^{-19H_a}$$

avec NO_{X_0} les émissions d'oxydes d'azote à humidité nulle et H_a l'humidité absolue de l'air.



FIG. 1 – Avion de combat P-47D équipé d'une injection eau-méthanol

En 1976 Peters et al. [69] étudient les effets de l'ajout d'eau sur le moteur à piston de deux manières différentes. La première est de substituer l'essence par une émulsion eau-essence sans

modification du moteur, la seconde est de garder l'essence comme carburant mais d'injecter directement l'eau à l'admission d'air du moteur. Ils constatent plusieurs phénomènes que Harrington [36] viendra confirmer en 1982 (injection d'eau sous forme liquide ou gazeuse dans la pipe d'admission). Les effets observés au cours de cette étude sont une forte diminution de la production des oxydes d'azote et une augmentation des émissions d'hydrocarbures imbrûlés lors d'une augmentation du rapport eau-essence dans l'émulsion. Du côté des performances moteurs, une augmentation de l'avance à l'allumage optimale, ainsi qu'une augmentation du pouvoir antidétonant du mélange air/eau/essence sont constatées lors d'une augmentation de la concentration d'eau dans les gaz frais. Harrington montre aussi une diminution de ces effets lors d'un passage d'une injection d'eau sous forme liquide à une injection d'eau sous forme gazeuse. Tsao et al. [89] rapportent une augmentation de puissance lors d'une augmentation du rapport eau/essence contrairement à Harrington rapportant le phénomène inverse, mais tous deux constatent une diminution de la consommation spécifique d'essence.

L'intérêt des autres types de carburation sur l'ajout d'eau dans les moteurs est beaucoup plus récent, il n'a débuté que dans les années 90. Les inconvénients des moteurs Diesel sont de produire des oxydes d'azote et des suies en quantité supérieure aux moteurs à allumage commandé, l'ajout d'eau dans les moteurs a tendance à limiter ces inconvénients. Lin et al. [56] et Lif et al [55] ont étudié l'effet de l'injection d'une émulsion eau-gasoil dans un moteur Diesel. Lif et al. ont montré une diminution des émissions polluantes de plus de 30% pour les NO_x , de 60% pour les particules, pour une émulsion contenant 15% d'eau. En revanche les émissions polluantes de CO et de HC augmentent. D'autres types de carburation ont aussi été étudiés tels que le GPL [66] ou plus récemment l'hydrogène pur [87].

Quel que soit le type de carburation utilisé dans les moteurs à piston, les tendances observées lors de l'augmentation de la concentration d'eau dans les gaz frais restent les mêmes. Ces tendances sont : une diminution de la production des oxydes d'azote, une augmentation des hydrocarbures imbrûlés ainsi qu'une augmentation de l'avance à l'allumage optimale dans le cas des moteurs à allumage commandé, ce qui sous-entend une diminution de la vitesse de combustion.

Les effets de la vapeur d'eau sur le comportement des flammes peuvent être causés par plusieurs mécanismes :

- Un mécanisme purement lié aux changements de capacité calorifique. En remplaçant une partie des gaz frais par de l'eau, la composition et donc la capacité calorifique des gaz brûlés changent ainsi que la température. Ceci peut influencer directement sur la température de flamme, sur la vitesse et sur les polluants.
- Un mécanisme simplement lié à la dilution du carburant. En ajoutant de la vapeur d'eau, même à richesse constante, la fraction massique de carburant baisse dans les gaz frais, menant directement à un changement des propriétés de la flamme.
- Un mécanisme chimique car l'espèce H_2O présente dans les gaz frais peut changer

certains chemins cinétiques et donc modifier le comportement de la flamme

Tous ces effets se combinent et la bibliographie ne donne pas de réponse tranchée sur leur importance relative. Dlugogorski *et al.* [22] montrent l'importance de l'effet de dilution et de modification de la capacité calorifique sur la vitesse de flamme laminaire prémélangée lors d'un ajout de vapeur d'eau dans les gaz frais. Ils montrent aussi que les effets de la chimie de H₂O sur S_L sont très faibles. Park *et al.* [68] étudient les effets de dilution (N₂, CO₂ et H₂O) sur une flamme de diffusion. Ils montrent que les effets de dilution et de capacité calorifique n'expliquent pas entièrement le phénomène de baisse de température lors d'ajout d'un diluant dans les gaz frais. Ils observent que le CO₂ produit une plus forte baisse de la température adiabatique de fin de combustion (T_{adiab}) que le H₂O, malgré une capacité calorifique plus grande de H₂O par rapport à CO₂. Les équilibres chimiques sont donc modifiés pour parvenir à de tels résultats. Hwang *et al.* [42] ainsi que Park *et al.* [67] mettent en évidence l'importance de la chimie de H₂O sur la température adiabatique de fin de combustion dans le cadre des flammes de diffusion. Ils observent une différence sur T_{adiab} entre les cas d'une dilution des gaz frais avec de l'H₂O et une dilution avec une espèce chimique artificielle XH₂O, ayant les mêmes propriétés thermiques et de transport que H₂O mais ne participant pas aux réactions chimiques. La température adiabatique de fin de combustion est plus élevée dans le cas de H₂O que dans le cas du XH₂O, mettant donc en évidence que la chimie de H₂O dans la combustion a pour effet d'augmenter T_{adiab} (par rapport au cas sans chimie). Cependant les effets de dilutions et de capacité calorifique restent prépondérants et T_{adiab} diminue avec la présence d'eau dans les gaz frais. Dryer [25] explique la diminution de CO lors d'ajout d'H₂O dans les gaz frais. Le radical OH augmente avec la présence d'eau dans les gaz frais car H₂O se décompose en OH à haute température par les réactions chimiques $\text{H}_2\text{O} + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{OH}$, $\text{H}_2\text{O} + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$ et $\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{OH} + \text{H}$. Le OH ainsi produit sert de catalyseur à l'oxydation du CO en CO₂ par la réaction $\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$. Zhao *et al.* [100] mettent en évidence l'augmentation du radical OH dans le cas d'une flamme de diffusion et montre la diminution des NO_x lors de l'ajout de vapeur d'H₂O dans les gaz frais. La présence d'H₂O dans les gaz frais fait diminuer la concentration des radicaux CH faisant à son tour diminuer la production du radical N dans le parcours $\text{HCN} \Rightarrow \text{NCO} \Rightarrow \text{NH} \Rightarrow \text{N}$. L'augmentation de OH a pour effet d'augmenter la production de NO_x, cependant la diminution de la concentration du radical N permet de diminuer plus encore la production de NO et la présence d'H₂O dans les gaz frais diminue la production des NO_x. Guo *et al.* [35] viennent confirmer le rôle de la chimie de H₂O dans la production des oxydes d'azotes. Ils montrent aussi que ces effets chimiques sur la production des NO_x sont plus importants lorsque l'on se trouve dans des mélanges riches.

Au cours de cette thèse on cherchera avant tout à quantifier les effets de l'ajout de vapeur d'eau sur les flammes. Chaque fois que cela sera possible, on essaiera d'indiquer quel mécanisme cause ces effets mais il est clair que cette tâche d'analyse des causes des effets de l'eau dépasse

le cadre du travail prévu pour cette thèse.

Mesures de vitesses de flammes laminaires prémélangées

Déterminer la vitesse de flamme d'un front laminaire prémélangé est un problème étudié depuis longtemps [47, 57] à la fois expérimentalement et théoriquement. La théorie des flammes laminaires prémélangées a attiré de nombreux mathématiciens célèbres car elle offrait un terrain d'application idéal aux méthodes asymptotiques [15, 98, 99]. Une grande partie de la physique de ce problème est donc comprise depuis plus de cent ans mais la complexité des mécanismes chimiques et de leurs interactions avec l'hydrodynamique fait qu'encore aujourd'hui, et malgré l'avènement du calcul numérique, mesurer une vitesse de flamme laminaire ou certaines caractéristiques d'ordre plus élevé de ces flammes (comme la longueur de Markstein [97]) reste un sujet de controverse très animé [24, 28, 37, 71, 79]. Dès 1939 Laffitte cite de nombreuses méthodes pour mesurer une vitesse de flamme. Ces méthodes diffèrent avant tout par la configuration de flamme étudiée :

- ① La méthode du brûleur où l'on mesure la surface (ou l'angle d'une flamme) *stabilisée* sur un brûleur (en général une fente bidimensionnelle ou un simple tube cylindrique).
- ② La méthode électrique [52, 96] ou la méthode photographique [58] qui mesurent la vitesse d'une flamme plane *propagative* dans un tube. La difficulté est ici de réussir à conserver un front de flamme plan, non instable, non affecté par les pertes thermiques aux parois. Ceci n'est pas possible pour tous les carburants et toutes les richesses [97]. En effet de nombreuses instabilités affectent les fronts de flamme laminaire plan qui forment souvent des cellules [15, 82] rendant ainsi toute mesure de vitesse imprécise. De plus, les flammes laminaires planes dans les tubes peuvent se coupler à l'acoustique du tube où on les place et entrer dans un mode qui n'a plus rien à voir avec le régime souhaité [80].
- ③ La méthode basée sur la pression dans une bombe dans laquelle se propage une flamme *sphérique* allumée par une bougie [29, 58, 95].

En fait, cette dernière méthode s'est avérée approximative car la pression monte pendant que la flamme se propage, les gaz frais sont donc comprimés et chauffés et par conséquent la vitesse de flamme, qui dépend fortement de la pression et de la température des gaz frais, change. On lui préfère aujourd'hui des mesures dans une grande bombe où les mesures sont effectuées pendant que la flamme sphérique est encore petite et n'influence pas la pression. On détecte sa position grâce à des hublots, chose délicate il y a 100 ans. Il convient donc d'ajouter aux méthodes citées par Laffitte au moins trois autres classes de méthodes [48, 50, 51] :

- ④ La méthode basée sur la position d'un front de flamme dans une bombe à pression quasi constante dans laquelle se propage une flamme sphérique allumée par une bougie [37, 24].

Parfois, ces mesures sont faites dans un écoulement convecté où chaque noyau allumé dans le canal est évacué vers l’aval [75] ce qui évite de construire une bombe mais complique un peu le suivi de la position de la flamme. Pour ces méthodes, obtenir la vitesse de la flamme à partir de sa position nécessite de connaître aussi le rapport de densité entre gaz frais et gaz brûlés ce qui est parfois délicat à faire de façon précise [74].

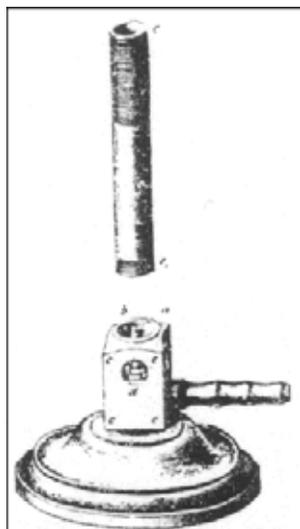
- ⑤ La méthode basée sur la mesure du champ de vitesse dans une flamme à contrecourant, possible seulement depuis la fin des années 1970 [28, 43, 49]. On stabilise ici une flamme entre deux écoulements à contre courant et on mesure le champ de vitesse dont on peut déduire la vitesse de flamme. L’exercice n’est pas simple car le champ de vitesse gazeux est lui-même fortement variable et des extrapolations sont nécessaires.
- ⑥ Le calcul numérique, qui peut être utilisé pour toutes les configurations indiquées précédemment. Il existe aujourd’hui des codes capables de prévoir la vitesse de flamme prémélangée laminaire si le schéma cinétique de la réaction est connu de façon fiable. Développés à partir des travaux du laboratoire national SANDIA aux USA dans les années 80 et aujourd’hui devenu un standard [32, 44, 83], ces codes sont fiables et disponibles dans le commerce dans leurs versions monodimensionnelles (CHEMKIN[®], COSILAB[®]).

Au cours de cette thèse, on a utilisé les méthodes ① et ⑥ pour caractériser l’effet de la vapeur d’eau sur la combustion de mélanges gazeux CH₄/air.

La méthode ①, appelée méthode du brûleur par Laffitte, est mieux connue sous le nom de brûleur Bunsen. Bunsen a développé des brûleurs de ce type au 19^{ème} siècle [11, 12]. C’est le principe de son brûleur et sa simplicité qui ont ensuite attiré beaucoup d’autres chercheurs. Un croquis du brûleur de Bunsen est fourni sur la figure 2 avec le portrait de cet illustre ancêtre.

La mesure de la vitesse de flamme par la méthode dite du bec Bunsen consiste à mesurer la surface de la flamme (ou l’angle fait par la flamme avec l’écoulement) pour en déduire la vitesse de propagation. Cette méthode peut être difficile à mettre en oeuvre et Laffitte indiquait déjà en 1939 que des écarts de mesure de près de 50 pour cent étaient obtenus dans certains cas entre deux auteurs [18, 90, 91]. En effet de nombreux facteurs peuvent influencer la mesure : pertes thermiques aux parois du brûleur, air entrant dans la flamme à sa base, flamme étirée et courbée, etc... On étudiera tout particulièrement l’influence de ces facteurs dans cette thèse et on montrera qu’il est possible de construire un dispositif de type bec Bunsen permettant d’obtenir des vitesses de flamme avec une précision comparable à celle des autres méthodes. L’avantage de cette méthode est sa (relative) simplicité de mise en oeuvre puisque la flamme est stationnaire et peut être aisément caractérisée par sa surface et angle. Ceci explique que cette méthode est encore largement utilisée aujourd’hui [17, 60, 63].

La seconde méthode utilisée (méthode ⑥) au cours de cette thèse est numérique : on utilisera ici le package COSILAB[®] qui fournit de nombreux calculs en combustion pour des schémas cinétiques quelconques en dimension zéro (calculs d’équilibre ou d’autoallumage) ou en une dimension



(a) Le brûleur Bunsen



(b) Robert W. Bunsen

FIG. 2 – Le brûleur Bunsen et son inventeur (*circa* 1860).

(flammes prémélangées dans notre cas). Mettre en oeuvre COSILAB[®] sur des flammes CH₄/air ne présente pas de difficulté particulière si ce n'est avoir confiance dans la qualité du schéma cinétique. On a choisi ici le schéma GRI-Mech 3.0 [30] qui est un schéma classique pour la combustion du méthane. La capacité de GRI-Mech 3.0 à prédire la combustion du méthane à toutes les pressions et températures reste un sujet ouvert : il est clair que les cinéticiens connaissent certaines failles à GRI-Mech et qu'il faut donc garder en tête que ce n'est qu'un modèle et pas une description exacte. Cependant c'est un standard mondial et on a décidé pour cette étude de se limiter à ce schéma cinétique dans le cas des flammes CH₄/Air. On étudiera aussi numériquement l'effet de l'eau sur des flammes d'isooctane pour se rapprocher d'un carburant moteur. Dans ce cas, le schéma employé sera le schéma de Hasse et al. [38] augmenté des schémas réactionnels responsables de la production des NO_x (partie thermique seulement).

Le besoin d'utiliser deux méthodes (Fig. 3) vient du fait que l'expérimentation peut comporter des barres d'erreur importantes et n'est facile qu'à pression et température ambiante. Il est nécessaire de la comparer avec des calculs COSILAB[®] faits à la même pression et température afin de vérifier l'expérimentation mais aussi, en même temps, de valider le schéma cinétique et sa capacité à prévoir l'effet de la vapeur d'eau. On peut alors envisager sereinement d'appliquer le calcul à des pressions plus élevées afin de se rapprocher des cas moteurs. On notera aussi que l'expérience ne fournit ici que la vitesse de flamme alors que le calcul fournira la vitesse de flamme et toute sa structure, y compris les polluants émis. Cette approche couplée calculs/expérimentation permet d'étudier l'effet de la vapeur d'eau à toutes les pressions et températures de gaz frais à

coût raisonnable.

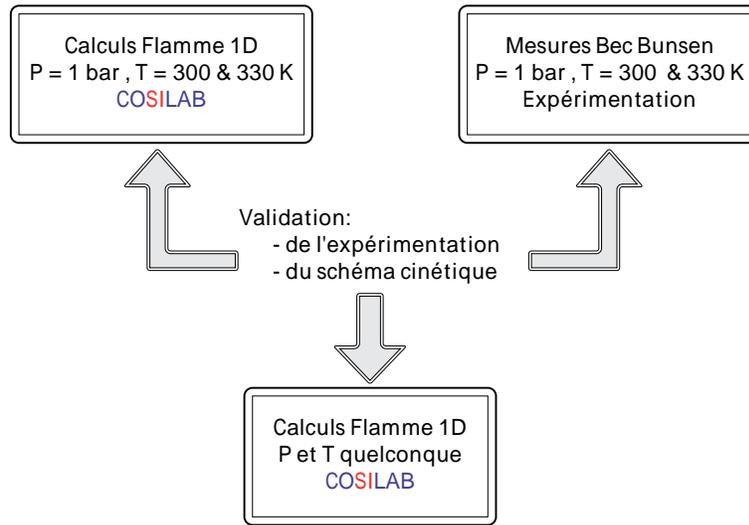


FIG. 3 – Organisation de la partie 'flamme laminaire'.

Organisation du manuscrit

Le premier chapitre de ce manuscrit expose les moyens numériques et expérimentaux mis en œuvre au cours de ce travail dans le cadre des flammes laminaires prémélangées. Dans un premier temps les outils numériques, permettant la modélisation de flammes laminaires, sont présentés. Dans un second temps, le banc expérimental du brûleur à bec Bunsen, conçu et réalisé au cours de ce travail pour mesurer une vitesse de flamme laminaire prémélangée, est décrit ainsi que la méthode de mesure associée. Ensuite, la précision de la méthode de mesure expérimentale, ainsi que la validation des résultats obtenus, sont exposées.

Le second chapitre du manuscrit est dédié à l'exploitation des résultats obtenus dans le cadre d'une flamme laminaire prémélangée. Dans un premier temps l'étude, se porte sur une flamme de prémélange air-humide / méthane à pression atmosphérique et température ambiante pour pouvoir comparer les résultats obtenus par les deux méthodes (numérique et expérimentale). Seule la vitesse de flamme laminaire est étudiée dans ce cas là. Ensuite l'influence de l'humidité de l'air est étudiée de manière numérique : les résultats exposés portent sur la vitesse de flamme, la température adiabatique de fin de combustion ainsi que la composition des gaz brûlés. Dans un second temps, l'étude porte sur l'influence de la température des gaz frais sur la combustion d'un mélange air-humide / méthane et air-humide / isoctane puis dans un troisième temps sur le comportement de la combustion de ces mélanges suite à une compression isentropique représentant la compression des gaz frais dans un moteur.

Le troisième chapitre du manuscrit concerne l'aspect plus appliqué de cette étude à savoir l'effet de l'humidité de l'air sur le fonctionnement d'un moteur à piston. Au début de cette partie, le fonctionnement d'un moteur à allumage commandé est donné. Ensuite, on décrit le banc d'essai recherche (moteur, installation, mesures) utilisé pour réaliser cette étude. Les résultats obtenus sur les performances moteur ainsi que les émissions polluantes sont exposés et discutés par comparaison avec les résultats obtenus sur la flamme laminaire prémélangée.

Chapitre 1

Les outils utilisés pour étudier les effets de H₂O sur une flamme laminaire prémélangée

1.1 Introduction

L'étude et l'analyse des effets de l'humidité de l'air sur un moteur n'est pas chose aisée. Nous avons choisi de passer par un outil intermédiaire pour identifier ces effets. Cet outil intermédiaire est une flamme laminaire prémélangée car il est "relativement" facile d'étudier ce type de flamme, aussi bien numériquement qu'expérimentalement. La première partie de ce chapitre (section 1.2) décrit les outils numériques mis en œuvre pour cette étude : le code de calcul utilisé ainsi que les schémas cinétiques utilisées. Les résultats obtenus sur les flammes laminaires prémélangées présentés dans le chapitre 2 sont principalement obtenus numériquement, les résultats expérimentaux servant à valider les outils numériques sur quelques grandeurs physiques uniquement, en particulier la vitesse de flamme. La deuxième partie de ce chapitre (section 1.3) décrit le banc expérimental mettant en œuvre une flamme laminaire prémélangée (brûleur à bec Bunsen). La troisième partie (section 1.3.5) décrit la validation de brûleur ainsi que les erreurs de mesures associées.

1.2 Les outils numériques

Il est courant d'écrire une réaction de combustion en 1 seule réaction chimique dite globale, à savoir pour une combustion air/méthane :



Mais la chimie est loin d'être si simple car elle fait intervenir une multitude de composés intermédiaires entraînant eux mêmes d'autres réactions chimiques se produisant les unes à la suite des autres ou simultanément. Par ailleurs, l'état final n'est pas celui écrit dans l'Eq. 1.1, il correspond plutôt à un équilibre chimique satisfaisant certaines relations en fonction des conditions de température et de pression. Il existe aussi dans le mélange final des espèces comme CO, C_XH_Y, NO_X et le recours aux outils numériques est indispensable pour pouvoir résoudre totalement le problème.

Un des outils numériques existant sur le marché permettant de résoudre cette difficulté est le logiciel CFD¹ COSILAB[®], qui couplé à un schéma de cinétique de la combustion du méthane tel que GRI-Mech 3.0 [30], permet de résoudre numériquement ce problème.

1.2.1 Rappel théorique de combustion

Un mélange de plusieurs espèces est caractérisé par plusieurs variables et propriétés, certaines propres à la totalité du mélange, d'autres propres à chaque espèce. On définit la proportion de chaque espèce k par [74] :

- la fraction massique ou molaire $Y_k = \frac{m_k}{m_{Total}}$ ou $X_k = \frac{n_k}{n_{Total}}$,
- la concentration molaire $[X_k] = \rho \frac{Y_k}{W_k}$.

Les propriétés et variables du mélange et des espèces sont consignées dans le tableau suivant :

	Masse molaire	Densité	Pression	Capacité Calorifique	Enthalpie
Espèce	W_k	$\rho_k = \frac{m_k}{V}$	$p_k = \rho_k \frac{RT}{W_k}$	C_{pk}	H_k
Mélange	$W = \sum_1^N X_k W_k$	$\rho = \sum_1^N \rho_k$	$P = \sum_1^N p_k$	$C_p = \sum_1^N C_{pk} Y_k$	$H = \sum_i^N H_k W_k$

Considérant qu'un problème de combustion conduit à résoudre un écoulement réactif multi-espèces en phase gazeuse, les variables sont :

- u, v, w les 3 composantes du vecteur vitesse d'une particule fluide de l'écoulement,
- ρ la densité du mélange,
- H l'enthalpie du mélange,
- Y_k ou X_k la fraction massique ou molaire de l'espèce k.

Considérant un problème à N espèces, on obtient donc un problème à $5 + N$ variables. Ces variables sont régies par des équations de conservation [74]. Les équations sont écrites avec la notation d'Einstein, pour $i = 1 : 3, j = 1 : 3,$ et $k = 1 : N$:

¹Computational Fluid Dynamics

- Conservation de la masse

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (1.2)$$

- Conservation de la quantité de mouvement

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} \quad (1.3)$$

- Conservation des espèces

$$\rho \frac{DY_k}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_i^c) Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (1.4)$$

- Conservation de l'énergie

$$\rho C_p \frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial T}{\partial x_i} \left(\rho \sum_k V_{ki} Y_k C_{pk} \right) + \dot{\omega}_T \quad (1.5)$$

Pour pouvoir déterminer $\dot{\omega}_k$ et $\dot{\omega}_T$, il est nécessaire de spécifier la cinétique des réactions chimiques. Considérons ici un ensemble de N espèces \mathcal{M}_k interagissant à travers M réactions :



Le taux de progression Q_j de chaque réaction j est donné par la relation suivante :

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu''_{kj}}$$

où K_{fj} et K_{rj} sont les taux directs et inverses de la réaction j . Ces constantes sont déterminées par la loi d'Arrhenius :

$$K_{f,j} = A_{f,j} T^{\beta_j} e^{-\frac{E_j}{RT}} = K_{rj} K_j \quad (1.6)$$

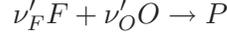
avec $A_{f,j}$, β_j , E_j et R respectivement la constante préexponentielle, l'exposant de température, l'énergie d'activation et la constante des gaz parfaits. K_j est une constante d'équilibre dépendante de la température, qui est en général disponible sous forme de tables.

Connaissant le taux de progression Q_j de chaque réaction, on peut déterminer le taux de production $\dot{\omega}_k$ de chaque espèce k :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = \sum_{j=1}^M Q_j \nu_{kj} W_k$$

$$\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$$

Ayant déterminé les variables et équations gérant le problème, il est possible de qualifier le prémélange en établissant la notion de stœchiométrie. L'étude portant seulement sur la combustion prémélangée, elle ne sera observée que pour ce cas. La réaction globale s'écrit :



Un nombre ν'_F de moles de carburant (**F**uel) et un nombre ν'_O de moles d'**O**xydant réagissent, par le biais de plusieurs réactions chimiques pour devenir les **P**roduits. On définit ici le rapport stœchiométrique :

$$s = \frac{\nu'_O W_O}{\nu'_F W_F} = \left(\frac{\text{masse d'oxydant}}{\text{masse de carburant}} \right)_{st} \quad (1.7)$$

où W_F et W_O représentent la masse molaire du carburant et de l'oxydant. Le nombre s correspond au rapport de la masse d'oxydant sur la masse de carburant nécessaire pour réaliser une combustion dans des proportions stœchiométriques. Cependant une combustion ne se fait pas forcément dans ces conditions. On définit donc la richesse ϕ du prémélange :

$$\phi = \frac{Y_F/Y_O}{(Y_F/Y_O)_{st}} = s \frac{Y_F}{Y_O}$$

où Y_F et Y_O représentent les fractions massiques de carburant et d'oxydant du prémélange et ϕ la richesse. D'après ces définitions, on peut qualifier le prémélange :

- $\phi = 1,0$ mélange stœchiométrique,
- $\phi > 1,0$ mélange riche,
- $\phi < 1,0$ mélange pauvre.

Une autre grandeur importante à définir est la vitesse de flamme laminaire. C'est un élément central dans la théorie de la combustion pour lequel beaucoup de définitions existent. La définition utilisée ici s'identifie à la vitesse de consommation des réactifs :

$$S_L = -\frac{1}{\rho_1 Y_F^1} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F dx$$

où Y_F^1 et ρ_1 sont la fraction massique de fuel et la densité en entrée du domaine. Cette définition présente l'avantage d'être facilement accessible numériquement.

1.2.2 Calcul 0D : EQUIL

Le calcul d'équilibre permet d'obtenir, à l'aide de la composition et des conditions initiales des gaz frais, la température et la composition de fin de combustion des gaz brûlés. Ce calcul ne

dépend de paramètres thermodynamiques et se base sur la minimisation de l'enthalpie libre du mélange multi-constituants [84].

$$G = \sum_{i=1}^I n_i \left[\bar{g}_i^o(T) + \bar{R}T \ln X_i + \bar{R}T \ln \frac{p}{p^o} \right]$$

Pour réaliser un calcul d'équilibre, deux bases de données sont nécessaires : les espèces impliquées et leurs caractéristiques thermodynamiques. Les caractéristiques thermodynamiques sont la capacité calorifique, l'enthalpie et l'entropie, et sont écrites sous forme polynomiale (appelé type NASA). Ensuite, il est nécessaire de définir un fichier de contrôle, qui contient les informations sur le type d'équilibre (ici enthalpie et pression constante), la composition des gaz frais prémélangés ainsi que la température et la pression initiale du prémélange.

1.2.3 Calcul 1D

Le calcul de flamme 1D libre correspond à un modèle qui existe rarement dans la réalité, mais c'est un outil de recherche intéressant qui s'applique notamment pour la détermination de la vitesse de flamme laminaire ou les profils de température et des espèces. Son principal intérêt réside dans le fait qu'un calcul 1D laminaire en combustion est facilement réalisable, autant en terme de temps que de moyen, comparé à un calcul multidimensionnel et/ou turbulent. Il permet en outre l'utilisation de schémas cinétiques de grandes dimensions, tout en conservant des temps de calcul raisonnables. Ce calcul de flamme se base sur les équations de conservation (de la masse, de la quantité de mouvement, des espèces et de l'énergie) ramenées à un cas 1D. Le détail de la réduction des équations est donné dans [85]. Le système d'équations est ainsi ramené à une équation de la forme suivante :

$$B(U) \frac{dU}{dt} = f(U)$$

où

$$U = (Y_1, \dots, Y_I, T, m)^T$$

Ce système linéaire est ensuite ramené à un système discrétisé par différences finies et est résolu à l'aide de 4 méthodes numériques : une méthode de Newton modifiée, une méthode d'extrapolation appelée Euler, un algorithme PISO1 pour la résolution d'un écoulement fluide instationnaire et une méthode de grille adaptative permettant de gérer les termes sources très "raides" du système d'équations discrétisé [85].

Pour réaliser un calcul de flamme 1D, 5 fichiers d'entrée sont nécessaires. Les 3 premiers sont les bases de données : une pour le schéma cinétique, deux pour les caractéristiques thermodynamiques et de transport des espèces. Un autre fichier contient les profils spatiaux initiaux des

variables. Le dernier fichier nécessaire est le fichier de contrôle, qui va fixer des conditions et l'aboutissement d'un calcul. En effet, c'est lui qui précise les conditions initiales et aux limites, les méthodes numériques et leurs paramètres, ainsi que les fichiers de sortie.

1.2.4 Les schémas cinétiques

1.2.4.1 Cas du méthane : GRI-Mech 3.0

De nombreuses études ont été menées sur la combustion du méthane dans l'air, aussi bien sur le plan expérimental que numérique. Il existe de ce fait plusieurs schémas cinétiques permettant de résoudre la combustion du méthane, les plus récents étant GRI-Mech 3.0 [30], Konnov [46] ou encore Hughes [41]. Le nombre de composés intermédiaires varie de 2 à plus de 120 espèces ainsi que de 2 à plus de 1200 réactions chimiques suivant les schémas. Le schéma cinétique choisi pour mener cette étude est GRI-Mech 3.0 (53 espèces et de 325 réactions élémentaires), c'est le plus répandu dans la littérature, il est donc validé par des résultats expérimentaux dans une large gamme de température, pression, richesse...

L'annexe B présente la liste des espèces employées par GRI-Mech 3.0 et les références où ce schéma peut être obtenu.

1.2.4.2 Cas de l'isooctane : schéma de Hasse

Les moteurs à allumage commandé (moteur AC) fonctionnent avec différents carburants : le méthane (ou le GNV²), le GPL³, le Superéthanol (ou E85⁴) et l'essence qui est le carburant le plus répandu pour le fonctionnement des moteurs AC. L'essence est composée d'une multitude d'hydrocarbures (alcanes, alcènes, hydrocarbures aromatiques, cycloalcanes, ...). Du fait de cette complexité chimique, il est très difficile de reproduire le schéma de cinétique chimique complet de ce carburant. Pour pallier ce problème l'essence est assimilée ici à un seul composé chimique qui représente globalement le comportement de l'essence : ce composé chimique est l'isooctane (C₈H₁₈).

Un des facteurs limitant dans l'étude numérique de la combustion de l'isooctane, est le schéma de cinétique chimique permettant de décrire sa combustion. Dans le cas du méthane, le choix du schéma cinétique s'est révélé être assez simple. En effet, malgré le grand nombre de schémas existants, seuls 2 ou 3 schémas sortent du lot par leurs nombres de validations numérique/expérimentale. Pour l'isooctane le choix n'est pas aussi simple. Tout d'abord, la cinétique de l'isooctane est beaucoup plus complexe que celle du méthane et aucun schéma ne fournit avec précision toutes les grandeurs nécessaires à cette étude (vitesse de flamme laminaire, délai d'auto

²Gaz Naturel Véhicule

³Gaz de Pétrole Liquéfié

⁴Composé de 85% d'éthanol et de 15% d'essence en volume

inflammation, polluants, ...). Ainsi il est possible avec certains schémas d'avoir la vitesse de flamme laminaire sans avoir la composition des gaz brûlés, alors que d'autres schémas donneront une partie de la composition des gaz brûlés (NO_x par exemple) et ne donneront pas de valeurs correctes pour la vitesse de flamme.

De nombreux schémas existent pour l'isooctane, comme les schémas complets de Curran *et al.* [20] (857 espèces, 3606 réactions), de Glaude *et al.* [10, 33] (351 espèces, 1684 réactions) ou des schémas réduits comme celui de Davis et Law [21] (69 espèces, 406 réactions) et de Hasse *et al.* [38]. C'est ce dernier schéma qui est utilisé pour cette étude. C'est un schéma de cinétique chimique réduit de l'isooctane comportant 29 espèces et 48 réactions chimiques (ces espèces et réactions sont détaillées dans l'annexe C). Ce schéma de taille très raisonnable permet d'obtenir la vitesse de flamme laminaire, la température adiabatique de fin de combustion ainsi que les émissions de monoxyde de carbone. Par contre il n'inclue pas les réactions nécessaires au calcul des oxydes d'azote : une modification a donc été apportée à ce schéma pour lui permettre de prédire ces émissions. Dans la combustion d'un carburant propre (un seul composé chimique : l'hydrocarbure CH_4 ou IC_8H_{18} par exemple) la source majeure des émissions de NO_x [62] est l'oxydation de l'azote contenu dans l'air par des mécanismes thermiques : le NO thermique (cf. section 2.3.3). L'ajout des schémas réactionnels des NO précoces n'a ici aucun intérêt car le schéma cinétique utilisé est un schéma réduit. Il ne permet donc pas de calculer les radicaux hydrocarbonés responsables du NO précoce (cf. section 2.3.3). Les schémas réactionnels du NO_x combustible ne sont pas non plus implémentés dans le schéma utilisé ici. En effet, le carburant utilisé (IC_8H_{18}) est un carburant mono composant ne comportant aucun atome d'azote responsable de la formation des NO_x combustibles. Seul les schémas réactionnels du NO thermique (Eq. 2.1) ont été rajoutés dans le schéma cinétique de Hasse (Annexe C). Les constantes des ces réactions (Eq. 1.6) sont extraites du schéma cinétique GRI-Mech 3.0 et sont reportées dans le tableau suivant :

Réaction	A (mol.cm.s.K)	β	E (cal.mol ⁻¹)
$\text{O} + \text{N}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{N}$	2,7E+13	0,0	355
$\text{N} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{NO} + \text{O}$	9,0E+09	1,0	6500
$\text{N} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H}$	3,36E+13	0	385

Le schéma de Hasse, ainsi modifié, permet donc d'étudier les effets de l'ajout d'eau sur la vitesse de flamme laminaire, la température adiabatique de fin de combustion, les émissions de monoxyde de carbone et d'oxydes d'azote.

1.2.5 Détermination des NO_x

En ce qui concerne les émissions de NO, la validité du schéma GRI-Mech 3.0 n'est pas acquise, en accord avec [30]. Ceci a été confirmé par Thomsen *et al.* [88]. La figure 1.1 présente deux pics

d'émissions de NO à des richesses de 1,0 et 1,35 obtenus par GRI-Mech, alors que les mesures expérimentales effectuées par Klassen *et al.* [45] montrent l'existence d'un unique pic dont la position varie sur des richesses supérieures à 1, selon la pression, la température et la dilution. Pour pouvoir interpréter ce problème, il est nécessaire de s'intéresser aux réactions responsables de la formation de NO. Il faudra donc garder en mémoire que les résultats sur les NO_x obtenus dans ce travail pour les flammes CH₄/Air peuvent être conditionnés par la validité de GRI-Mech, une question qui dépasse le cadre de cette thèse. La même remarque pourra être faite pour l'isooctane.

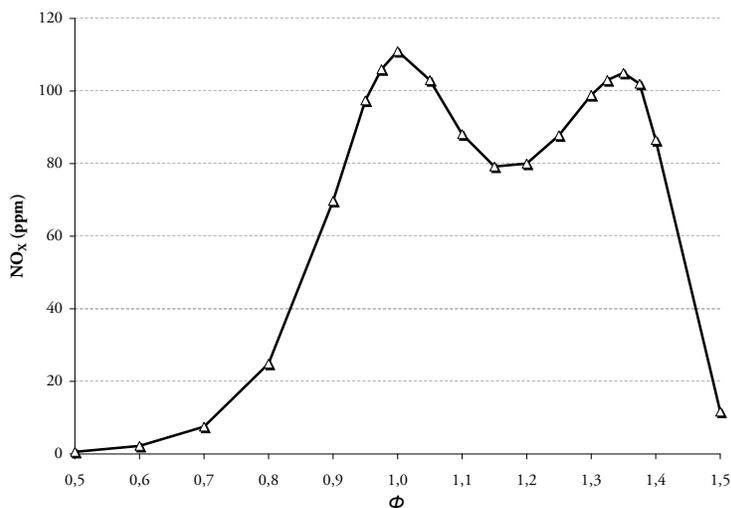


FIG. 1.1 – Fraction massique de NO_x dans les gaz brûlés, pour un prémélange CH₄/air sec, à pression atmosphérique et à une température de 300 K.

1.3 Mesure expérimentale de vitesse de flamme laminaire

1.3.1 Introduction

Il existe de nombreuses méthodes de mesure de vitesse de flammes laminares. En pratique, la méthode intuitive qui consisterait à mesurer la vitesse d'une flamme se propageant dans un tube n'est quasiment jamais utilisée car ces flammes ne restent pas stables. Il faut donc avoir recours à d'autres techniques et les plus connues sont [74] :

- les flammes stationnaires créées sur un plan de stagnation [43, 49],
- les flammes sphériques propagatives [1, 2, 24, 34, 37],
- les flammes stationnaires de type bec Bunsen comme celles employées dans cette thèse [9, 17, 63, 65].

Toutes ces méthodes posent des problèmes de précision de plusieurs types :

- Définition de la vitesse de flamme : consommation ou déplacement [74],
- Erreurs de mesure : courbure et gradients de vitesse affectent la vitesse de flamme, ainsi que d'autres phénomènes physiques (pertes de chaleur par exemple) affectent aussi la vitesse de flamme. Il faut savoir évaluer leurs influences sur la mesure de s_L^0 .

a. Définitions

Il faut tout d'abord définir quelle vitesse de flamme on cherche à mesurer. En effet il existe au moins deux vitesses de flamme [74] : la vitesse de déplacement s_d et la vitesse de consommation s_c . Suivant la méthode utilisée, on a accès à l'une ou l'autre et elles ne sont pas toujours égales. A ce stade il est utile de rappeler les définitions de ces différentes vitesses [74] :

- La vitesse de flamme de référence est la vitesse de flamme laminaire prémélangée monodimensionnelle plane, non étirée que nous appellerons ici s_L^0 (parfois s_L sur certaines figures de ce manuscrit). C'est la grandeur intrinsèque caractérisant la propagation d'une flamme 'parfaite' non perturbée et c'est celle ci que nous cherchons à mesurer. Elle est indépendante de toute configuration pratique de brûleur : c'est une grandeur qui ne dépend que de la pression, de la température et de la composition des gaz frais. Il n'existe malheureusement pas de configuration expérimentale permettant de mesurer cette vitesse de façon exacte. En effet, sur un vrai brûleur, on mesure en général l'une des vitesses suivantes :
- La vitesse de déplacement s_d caractérise la vitesse à laquelle le front de flamme se déplace par rapport à l'écoulement. Si la vitesse du front dans un repère fixe est \vec{w} et la vitesse de l'écoulement est \vec{u} , la vitesse de déplacement s'écrit :

$$s_d = (\vec{w} - \vec{u}) \cdot \vec{n} \quad (1.8)$$

où \vec{n} est la normale locale au front pointant vers les gaz frais.

- La vitesse de consommation mesure la vitesse à laquelle les gaz frais sont consommés dans le front de flamme. Elle est définie par :

$$s_c = -\frac{1}{\rho_1 Y_F^1} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\omega}_F dx \quad (1.9)$$

où l'intégration se fait suivant la normale au front. ρ_1 est la densité des gaz frais, Y_F^1 la fraction massique de carburant dans les gaz frais et $\dot{\omega}_F$ est le taux de consommation local de carburant.

Pour une flamme laminaire, prémélangée, monodimensionnelle, plane, stable, non étirée, sans effet de bord et sans pertes thermiques, on montre aisément que ces trois vitesses de flammes sont égales : $s_c = s_d = s_L^0$: la flamme plane parfaite avance vers les gaz frais à s_L^0 (donc $s_d = s_L^0$) et brûle ces gaz à la vitesse s_L^0 (donc $s_c = s_L^0$). Mais dans la plupart des autres cas, ces trois vitesses de flammes sont toutes différentes et déduire s_L^0 de la connaissance de s_c ou s_d peut être

délicat : le long de la plupart des fronts de flamme réels, s_c et s_d changent car l'étirement local du front et sa courbure modifient la vitesse de flamme.

Quand on utilise un dispositif de type Bunsen pour mesurer une vitesse de flamme, c'est à la vitesse de consommation s_c que l'on a accès. C'est même la moyenne de s_c tout le long de la flamme du bec Bunsen qui, en fait, est mesurée. On montrera dans ce chapitre comment on peut remonter de cette mesure à la vitesse de flamme s_L^0 .

b. Effet de l'étirement

Aucune des méthodes ci-dessus ne mesure vraiment la vitesse de flamme à étirement nul car ces flammes sont toutes étirées ou courbées (ou les deux en même temps comme le bec Bunsen). L'étirement κ d'un front de flamme est une grandeur locale définie par [13] :

$$\kappa = \nabla_t \cdot \vec{u} - s_d \left(\frac{1}{\mathcal{R}_1} + \frac{1}{\mathcal{R}_2} \right) = \nabla_t \cdot \vec{u} + s_d \nabla_t \cdot \vec{n} \quad (1.10)$$

où \vec{u} est la vitesse du gaz, \mathcal{R}_1 et \mathcal{R}_2 sont les rayons de courbure locaux de la surface de flamme et la notation ∇_t signifie que l'on prend un gradient dans le plan tangent à la flamme.

La théorie asymptotique des flammes laminares [14, 48, 54, 81, 97] montre comment l'étirement κ d'une flamme (dû au gradient de vitesse dans le plan du front de flamme et à la courbure du front) modifie la vitesse de flamme. La vitesse de flamme s_c d'une flamme étirée peut être reliée à la vitesse de flamme non étirée s_L^0 par une formule issue des méthodes asymptotiques :

$$s_c = s_L^0 - \mathcal{L}\kappa \quad (1.11)$$

où \mathcal{L} est une longueur appelée longueur de Markstein qui dépend seulement du mélange réactif. L'expression asymptotique de \mathcal{L} est donnée par exemple par Clavin et Joulin [16] pour la vitesse de consommation :

$$\mathcal{L} = M_a^c * \delta_L^0 \quad \text{avec} \quad M_a^c = \frac{1}{2} \beta (Le_F - 1) \frac{T_1}{T_2 - T_1} \int_0^{\frac{T_2 - T_1}{T_1}} \frac{\ln(1+x)}{x} dx \quad (1.12)$$

où M_a^c est le nombre de Markstein, δ_L^0 l'épaisseur de flamme laminaire et Le_F le nombre de Lewis du réactif déficient gazeux.

En théorie, il est donc possible de mesurer s_L^0 à partir de l'expression 1.11 si l'on connaît s_c pour un étirement donné κ et le nombre de Markstein. En pratique, connaître M_a^c est encore plus difficile que trouver s_c et la littérature contient de nombreuses discussions sur la précision des mesures de s_L^0 et M_a^c [71, 74]. La formule 1.11 garde cependant un intérêt dans le cadre de cette thèse car elle permet d'évaluer l'erreur de mesure due au fait que la flamme, du bec Bunsen employé ici, n'est pas à étirement nul (Annexe A).

c. Erreurs de mesure

La vitesse de flamme calculée sur le bec Bunsen dépend explicitement de plusieurs grandeurs physiques entachées d'une erreur de mesure. On évaluera l'ordre de grandeur de chacun de ces termes dans la section 1.3.5.

1.3.2 Une expérimentation bidimensionnelle laminaire

Le principe de l'expérimentation développée dans cette section est de mesurer la vitesse de flamme de mélange CH_4 / Air / Vapeur d'eau dans une configuration laminaire où une flamme triangulaire est créée au dessus d'une buse alimentée par un mélange idéalement parfait de ces trois gaz.

1.3.2.1 Le brûleur

Le brûleur bec Bunsen a été conçu et réalisé au cours de cette thèse, de manière à avoir un mélange homogène et laminaire en sortie de buse. Le brûleur peut être décomposé en trois étages (Fig. 1.2) qui ont chacun leur rôle dans la préparation du mélange : le mélangeur, le tranquillisateur et le convergent.

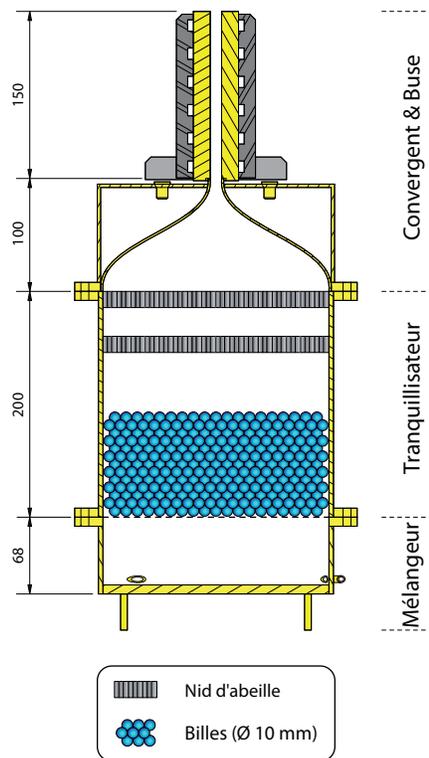


FIG. 1.2 – Vue de coupe du brûleur (cotes en mm)

Le premier étage est le mélangeur (200 mm de diamètre sur 68 mm de hauteur), qui est le seul élément cylindrique du brûleur. Cette différence de géométrie par rapport aux autres ensembles du brûleur a été choisie afin d'optimiser le mélange par un phénomène de swirl initié par l'injection d'air tangentiellement au cylindre (Fig. 1.3). Le méthane arrive perpendiculairement au mouvement de swirl créant ainsi de la turbulence favorisant le mélange des deux gaz.

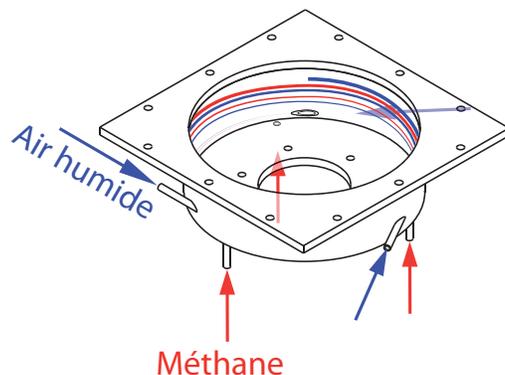


FIG. 1.3 – Principe du mélangeur

Le second étage est la chambre de tranquillisation de 200 mm de hauteur et de 200×200 mm² de section. Il est constitué de trois éléments. Le premier est une grille perforée ($\varnothing_{trous} = 8$ mm) qui permet de casser le mouvement de swirl créé au niveau du mélangeur. Le second étage est un empilement de billes de verre de diamètre 10 mm sur une hauteur de 100 mm, qui ont pour rôle de briser toutes les " grosses " structures tourbillonnaires et d'homogénéiser le mélange sur toute la section du brûleur. L'empilement des billes a un effet non négligeable sur le front de flamme. Si cet empilement est parfait (cubique centré par exemple) le front de flamme devient plissé à plusieurs endroits. Sans les billes, la flamme est, en plus d'être structurée et de présenter des cellules, instable (Fig. 1.4). Pour que la flamme ne présente aucun défaut, l'arrangement des billes doit être désordonné. Le troisième et dernier élément de la chambre de tranquillisation est une succession de grilles en nid d'abeille en aluminium (15 mm d'épaisseur et 5 mm de taille d'alvéole) afin de finir de casser toutes les structures tourbillonnaires de l'écoulement pour le rendre laminaire.

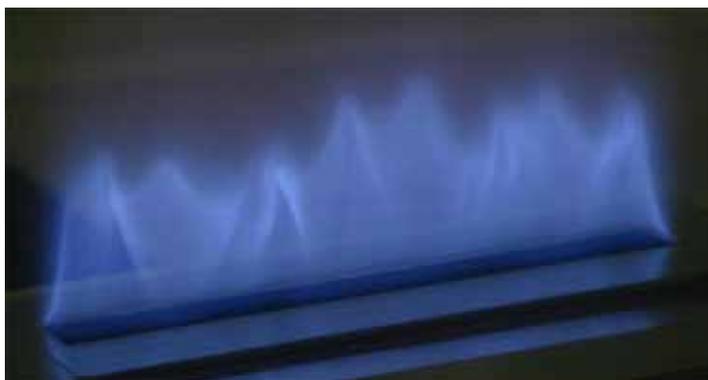


FIG. 1.4 – Photo de la flamme sans bille dans la chambre de tranquillisation

Le dernier étage du brûleur est l'ensemble convergent / buse. Le convergent est dimensionné

[3, 61] pour avoir un profil de vitesse plat en sortie de convergent. La sortie du convergent est une fente ayant pour dimension 10 mm de largeur par 100 mm de longueur (Fig. 1.5). Une buse de 150 mm de hauteur prolonge la fente en sortie de convergent pour éviter les phénomènes d'instabilité de combustion (section 1.3.4).

Afin d'éviter l'apparition de gradients thermiques au sein de l'écoulement dus à l'échauffement de la buse par la flamme, un circuit d'eau thermostaté est placé de part et d'autre de la buse afin que celle-ci garde une température constante et homogène tout au long des campagnes de mesures. Il reste néanmoins un gradient thermique au niveau de la sortie de buse dû à la présence de la flamme (Fig. 1.6), mais cette élévation locale de température de la buse n'a pas ou que très peu d'influence sur l'écoulement : des transferts thermiques notables n'ont pas le temps de s'établir sur une si faible distance (quelques millimètres).

L'adjonction d'une buse en sortie de convergent a pour inconvénient d'épaissir les couches limites de l'écoulement. Cependant avec la méthode de mesure utilisée, basée sur la conservation du débit total à travers la surface de flamme totale (Section 1.3.3), il n'est pas nécessaire d'avoir un profil plat de vitesse en sortie de buse. La hauteur de la buse n'a donc que très peu d'influence sur la mesure de vitesse de flamme.

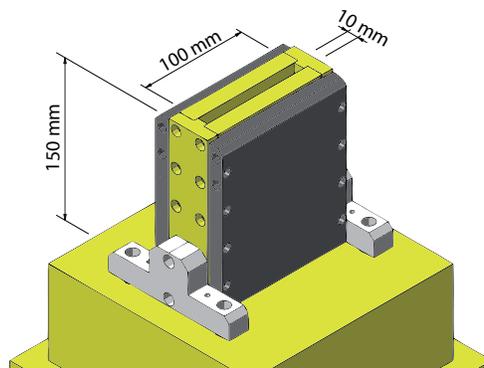


FIG. 1.5 – Buse du brûleur

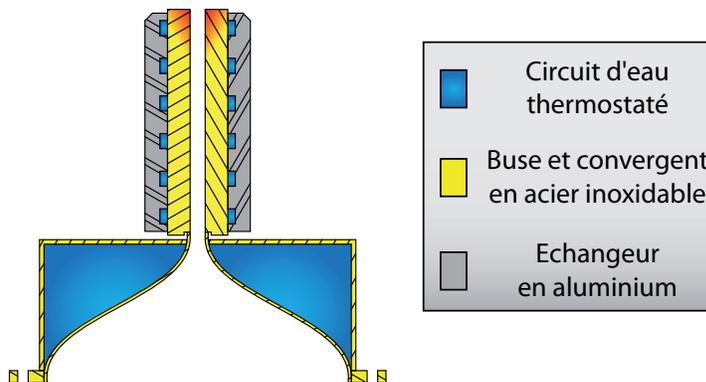


FIG. 1.6 – Système de refroidissement de la buse et du convergent

1.3.2.2 Instrumentation du banc expérimental

Le plan de circulation des fluides est décrit de façon détaillée sur la Fig. 1.7. Le brûleur est alimenté par 2 gaz, le premier est l'oxydant (air) dopé à la vapeur d'eau, le second est le carburant en l'occurrence le méthane. Le brûleur a été dimensionné pour opérer dans un large domaine de fonctionnement et le Tableau 1.1 récapitule les différentes plages des grandeurs d'entrée du brûleur.

Variable	Minimum	Maximum
U (m.s ⁻¹)	0	2
ϕ	0,5	1,5
H_R (%)	0	100
T_{gf} (K)	293	330

TAB. 1.1 – Plages des grandeurs d'entrée (U vitesse, ϕ richesse, H_R humidité relative et T_{gf} température des gaz frais)

Chaque débit est contrôlé par un débitmètre régulateur BronkHorst[®] massique, dont l'étendue de mesure est indiquée dans le Tableau 1.2.

Fluide	Modèle BronkHorst [®]	Etendue de mesure
Air	F-201AV-AAA-33-V	2 à 100 nl.min ⁻¹
Méthane	F-201CV-AAA-33-V	0,381 à 19,05 nl.min ⁻¹
Eau	L23-AAD-33-O	20 à 1000 g.h ⁻¹

TAB. 1.2 – Etendue de mesure des débitmètres

Le système permettant de générer de l'air chargé d'eau, le CEM (Controlled Evaporator Mixer) est un système commercialisé par Bronkhorst[®]. Ce système a été choisi pour sa simplicité de mise en oeuvre et de fonctionnement par rapport à d'autres systèmes tels que le bulleur par exemple. Le CEM est rapide, précis, a une bonne répétabilité et permet aussi de chauffer le gaz porteur, en l'occurrence l'air. Le CEM a donc deux fonctions, la génération de vapeur d'eau et le chauffage des gaz frais. La régulation en température du CEM est assurée par une sonde Pt100, interne au boîtier, reliée au PC d'acquisition. La gamme de régulation possible en température du CEM est de 0°C à 200°C. Afin de minimiser le temps de chauffe du banc et les pertes thermiques, les canalisations sont isolées thermiquement par des manchons acceptant des températures maximales de 110°C. Cependant, les pertes thermiques au niveau des canalisations et de l'enceinte permettent uniquement d'atteindre une température maximale des gaz frais de 80°C (353 K). Pour des raisons de sécurité la température des gaz frais en sortie de buse ne dépassera pas les 57°C (330 K).

1.3.2.3 Dispositifs de sécurité

Une partie non négligeable pendant la mise au point du banc expérimental a été la mise en sécurité du banc ainsi que de l'expérimentateur. Tous les brûleurs comportent un certain nombre de dangers, tels que la production de monoxyde de carbone ou encore l'explosion du brûleur. La partie mise en sécurité du banc et de l'expérimentateur a donc été un facteur très important lors de la conception.

a. Flashback

Le premier point de sécurité soulevé avant même la conception du brûleur a été le phénomène de flashback inhérent à toute expérimentation en prémélange (remontée de la flamme dans l'enceinte), qui peut dans certain cas amener à l'explosion de l'enceinte contenant le prémélange. Pour pallier ce problème, un disque de rupture (cf Fig. 1.8) est placé sur le mélangeur situé sur la partie inférieure de l'enceinte (cf Fig. 1.2). Le disque de rupture a été dimensionné [39] de telle manière que la pression maximale dans l'enceinte en cas de flamme atteignant cette zone ne dépasse pas 1,6 bar en absolu, ce qui compte tenu des dimensions du système et du mélange air/CH₄ employé, donne par un calcul numérique non décrit ici une pression de rupture du disque de 1,4 bar. En cas de rupture du disque la décharge de l'enceinte s'effectue au sein même de la salle d'expérimentation et, compte tenu de la vitesse de combustion et du diamètre du disque, la pression ne dépasse alors pas 1,6 bar avant de retomber à 1 bar.

Suite à un flashback, la flamme peut soit s'éteindre d'elle-même faute de mélange ou encore trouver un point d'accrochage dans l'enceinte même où on continue d'injecter des réactifs. Pour éviter le deuxième cas de figure, un thermocouple de faible inertie thermique est placé juste au dessous du convergent. En cas de flash-back il commande, par l'intermédiaire d'un affi-

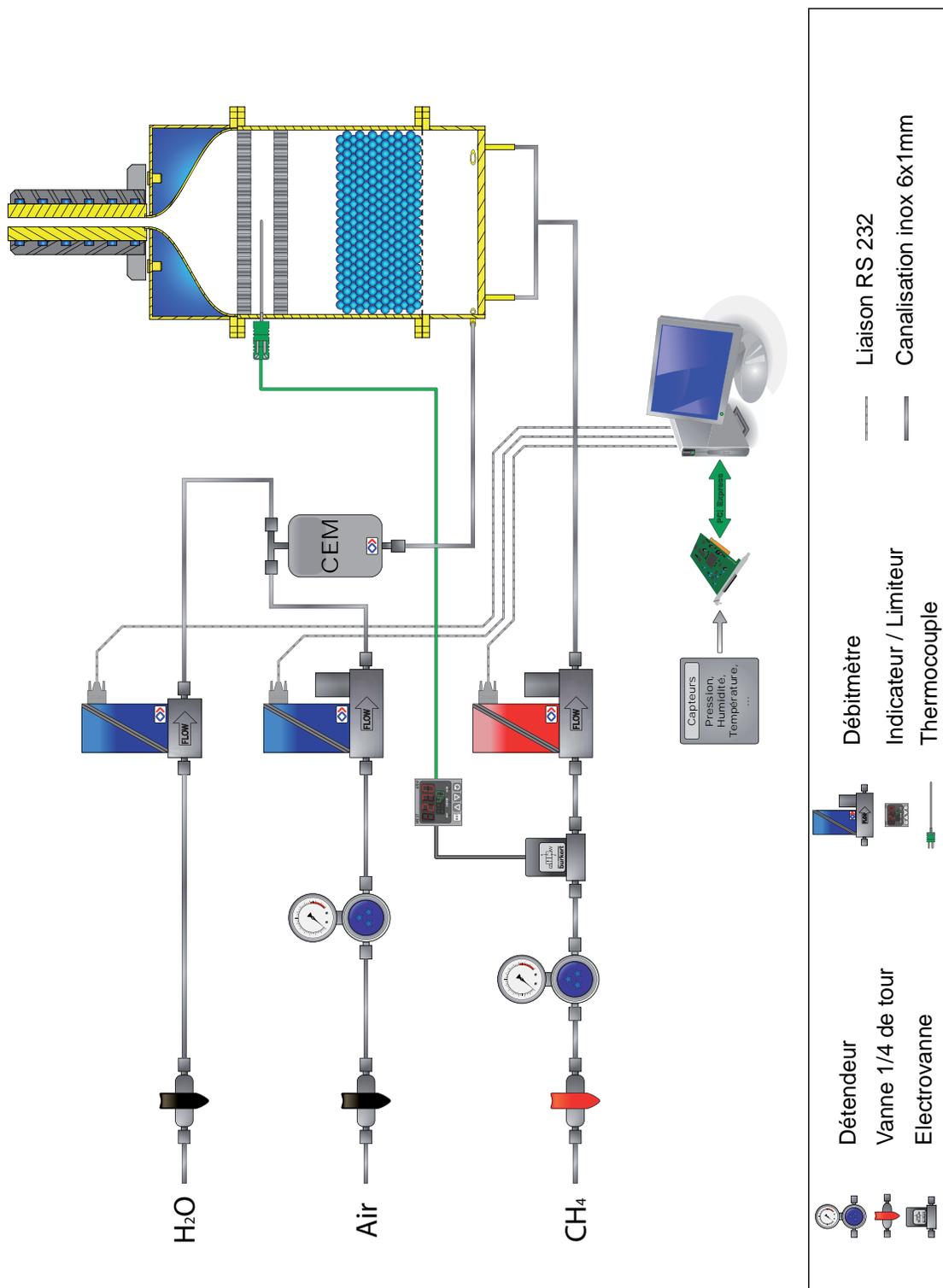


FIG. 1.7 – Plan de circulation des fluides

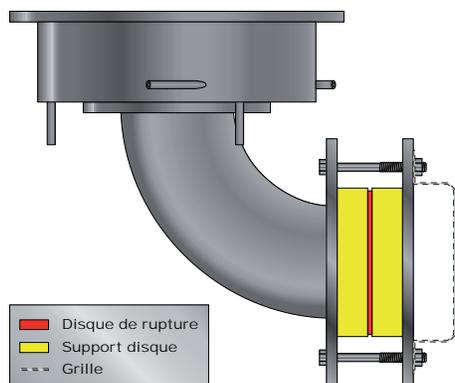


FIG. 1.8 – Installation du disque de rupture

cheur/limiteur de niveau, une électrovanne située sur l'arrivée de méthane (cf Fig. 1.7) et permet d'interrompre le débit de carburant. La consigne de température limite fixée au limiteur est 15°C de plus que la température des gaz frais.

b. CO et CH_X

Les produits issus de la combustion sont dangereux pour la santé de l'utilisateur. De même rejeter des hydrocarbures imbrûlés au sein de la pièce peut mener à une explosion. Pour pallier ces deux phénomènes, une cellule de détection de gaz est présente dans la pièce. Elle mesure par l'intermédiaire de deux capteurs les concentrations en CO et le niveau d'explosivité (CH_4) présent dans la salle. En cas de niveau trop important de l'un des deux gaz, la cellule coupe l'arrivée du méthane au niveau d'une vanne pneumatique située à l'extérieur du bâtiment.

1.3.2.4 Débitmétrie

a. Définition de l'humidité dans un mélange air-eau

Il y a plusieurs moyens de définir l'humidité de l'air. Le plus usuel est l'humidité relative (H_r), définie comme le rapport entre la pression partielle de vapeur d'eau ($P_{\text{H}_2\text{O}}$) contenue dans l'air sur la pression de vapeur saturante à la même température :

$$H_r = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{\text{sat}}(T)} \quad (1.13)$$

Elle a pour avantage d'être facilement compréhensible :

- air sec $\rightarrow H_r = 0$,
- air saturé en vapeur d'eau $\rightarrow H_r = 1$ (ou 100%).

Mais l'humidité relative reste une grandeur qualitative, car elle est fonction de la température du mélange. Pour mieux définir quantitativement l'humidité de l'air, il est préférable d'utiliser l'humidité absolue (H_a), qui est définie comme la masse de vapeur d'eau ($m_{\text{H}_2\text{O}}$) exprimée en gramme contenue dans un kilogramme d'air sec (m_{as}) :

$$H_a = \frac{m_{\text{H}_2\text{O}}}{m_{as}}$$

H_a s'exprime en g_{H₂O}/kg_{air sec}. L'air sec et la vapeur d'eau contenue dans l'air humide peuvent être assimilés à des gaz parfaits :

$$m_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{r_{\text{H}_2\text{O}}T} \quad , \quad m_{as} = \frac{P_{as}}{r_{as}T}$$

avec $r_{as} = 287,05$ J/kg.K et $r_{\text{H}_2\text{O}} = 461,51$ J/kg.K constantes des gaz.

L'application de la loi de Dalton conduit à :

$$P = P_{as} + P_{\text{H}_2\text{O}}$$

Ce qui donne :

$$H_a = \frac{\frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{r_{\text{H}_2\text{O}}T}}{\frac{P_{as}}{r_{as}T}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P_{as}} \frac{r_{as}}{r_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P - P_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{r_{as}}{r_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{r_{as}}{r_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{1}{\frac{P}{P_{\text{H}_2\text{O}} - P_{\text{H}_2\text{O}}}}$$

$$H_a = \frac{m_{\text{H}_2\text{O}}}{m_{as}} = 0,622 \frac{1}{\frac{P}{P_{\text{H}_2\text{O}} - P_{\text{H}_2\text{O}}}} \quad (1.14)$$

On peut aussi utiliser l'humidité spécifique (s_H), qui est définie comme le rapport de la masse d'eau dans l'air sur la masse d'air humide (exprimée en g_{H₂O}/kg_{air}). Les résultats seront exprimés dans ce document en humidité spécifique.

$$s_H = \frac{m_{\text{H}_2\text{O}}}{m_{as} + m_{\text{H}_2\text{O}}}$$

A partir de la définition de l'humidité, on peut calculer la fraction molaire d'eau à l'état vapeur que contient l'air. On considère un air composé de O₂, de N₂ et de H₂O avec $X_{\text{N}_2}/X_{\text{O}_2} = 3,76$ (X_k est la fraction molaire de l'espèce k). On peut donc écrire :

$$X_{\text{O}_2} + X_{\text{N}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}} = 1 \quad (1.15)$$

On définit $n_{\text{H}_2\text{O}}$ comme étant le rapport de la fraction molaire de H₂O sur la fraction molaire de O₂ :

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{X_{\text{H}_2\text{O}}}{X_{\text{O}_2}} \quad (1.16)$$

L'air se comportant comme un gaz parfait à faible pression, la loi des gaz parfaits s'applique donc pour l'air humide :

$$PV = NRT \quad (1.17)$$

La vapeur d'eau contenue dans l'air humide est elle aussi considérée comme un gaz parfait.

$$P_{\text{H}_2\text{O}}V = N_{\text{H}_2\text{O}}RT$$

En faisant le rapport des deux précédentes équations on obtient :

$$\frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P} = \frac{N_{\text{H}_2\text{O}}}{N} \quad (1.18)$$

Le nombre de moles d' H_2O peut s'exprimer en fonction du nombre de moles d' O_2 d'après Eq. 1.16 :

$$N_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{H}_2\text{O}}N_{\text{O}_2}$$

Le nombre de moles total dans l'air peut s'écrire :

$$N = N_{\text{O}_2} + N_{\text{N}_2} + N_{\text{H}_2\text{O}}$$

Ce qui donne pour Eq. 1.18 :

$$\frac{P_{\text{H}_2\text{O}}}{P} = \frac{N_{\text{H}_2\text{O}}}{N_{\text{O}_2} + N_{\text{N}_2} + N_{\text{H}_2\text{O}}} = \frac{n_{\text{H}_2\text{O}}N_{\text{O}_2}}{(1 + 3,76 + n_{\text{H}_2\text{O}})N_{\text{O}_2}} = \frac{n_{\text{H}_2\text{O}}}{1 + 3,76 + n_{\text{H}_2\text{O}}}$$

et donc :

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{4,76}{\frac{P}{P_{\text{H}_2\text{O}}} - 1}$$

En utilisant Eq. 1.13, on obtient :

$$n_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{4,76}{\frac{P}{H_r P_{\text{sat}}(T)} - 1} \quad (1.19)$$

b. Calcul des fractions massiques dans un mélange air-eau-méthane

On considère un mélange air-humide / méthane (CH_4) et on cherche à exprimer les fractions massiques de toutes les espèces en fonction de deux grandeurs : l'humidité relative (H_r) et la richesse (ϕ).

Par définition la somme des fractions massiques est égale à 1 :

$$\sum_k Y_k = 1 \quad (1.20)$$

Or on sait que :

$$Y_{\text{H}_2\text{O}} = X_{\text{H}_2\text{O}} \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}}{W} = X_{\text{O}_2} n_{\text{H}_2\text{O}} \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}}{W} = Y_{\text{O}_2} \frac{W}{W_{\text{O}_2}} n_{\text{H}_2\text{O}} \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}}{W}$$

$$Y_{\text{H}_2\text{O}} = n_{\text{H}_2\text{O}} \frac{W_{\text{H}_2\text{O}}}{W_{\text{O}_2}} Y_{\text{O}_2}$$

avec W masse molaire du mélange et W_k masse molaire de l'espèce k . La richesse du mélange est donnée par le rapport de la fraction massique de fuel à la fraction massique d'oxydant :

$$\phi = s \frac{Y_f}{Y_{O_2}} \quad (1.21)$$

avec s rapport stœchiométrique (Eq. 1.7). Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \sum_k Y_k = 1 &= Y_f + Y_{O_2} + Y_{N_2} + Y_{H_2O} \\ &= Y_f \left(1 + \frac{s}{\phi} \left(1 + 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} \right) + \frac{s}{\phi} n_{H_2O} \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} \right) \end{aligned}$$

Donc :

$$Y_f = \frac{1}{1 + \frac{s}{\phi} \left(1 + 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} + n_{H_2O} \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} \right)} \quad (1.22)$$

Les fractions massiques d'oxygène, d'azote et d'eau s'expriment alors en fonction de la fraction massique de fuel donnée par l'équation :

$$Y_{O_2} = \frac{s}{\phi} Y_f \quad (1.23)$$

$$Y_{N_2} = \frac{s}{\phi} 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} Y_f \quad (1.24)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{s}{\phi} n_{H_2O} \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} Y_f \quad (1.25)$$

L'évolution des fractions massiques en fonction de l'humidité spécifique est représentée sur Fig. 1.9

c. Calcul des débits

Le banc de combustion est conçu pour faire des mesures avec le moins de variables d'entrées possibles. Il a été choisi de fonctionner avec une vitesse moyenne U constante en sortie de buse quelle que soit la composition du mélange (riche/pauvre, sec/humide, ...).

Les points de fonctionnement sont définis par 4 paramètres (Tableau 1.1) :

- U , vitesse moyenne en sortie de buse (m.s⁻¹),
- ϕ , richesse du mélange,
- H_r , humidité de l'air (%),
- T_{gf} , température du mélange en sortie de buse (K).

La définition de l'humidité de l'air retenue ici est l'humidité relative H_r car elle permet de placer directement le point de fonctionnement par rapport à la saturation.

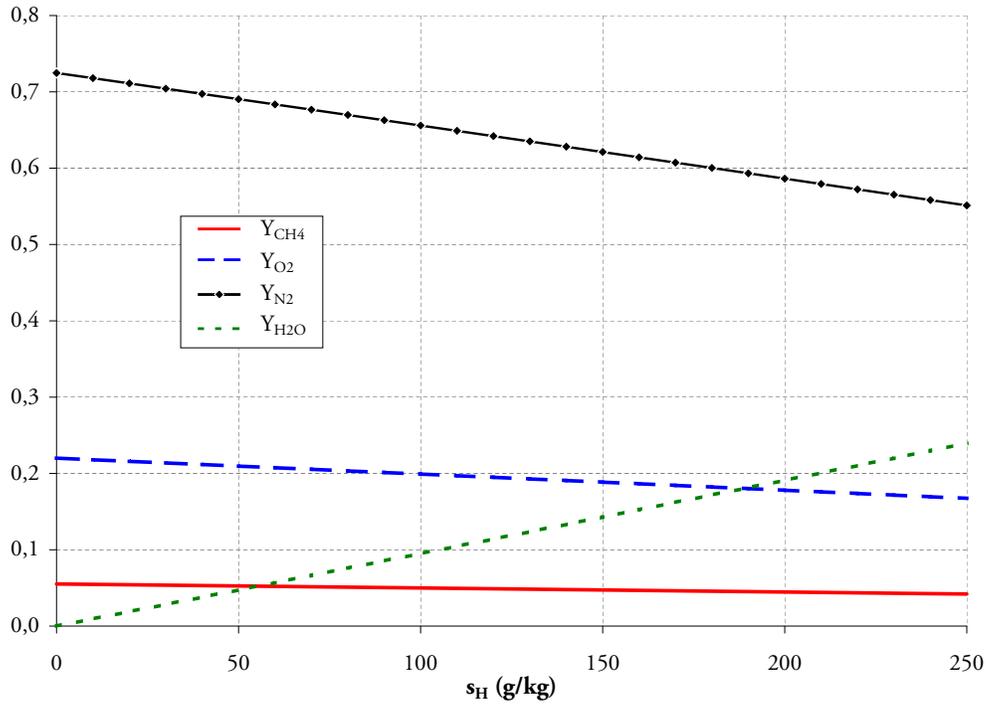


FIG. 1.9 – Évolution des fractions massiques en fonction de l'humidité spécifique du mélange

Les paramètres sont ajustés en réglant trois débits : \dot{m}_{as} , \dot{m}_{H_2O} , \dot{m}_{CH_4} et une température. La richesse est définie par sa valeur globale :

$$\phi = s \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_{O_2}}$$

Dans l'air le rapport entre les fractions molaires d'oxygène et d'azote est constant $X_{N_2} = 3,76X_{O_2}$, ce qui donne pour les fractions massiques :

$$Y_{N_2} = 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} Y_{O_2}$$

D'après Eq. 1.16

$$n_{H_2O} = \frac{X_{H_2O}}{X_{O_2}} = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{O_2}} \frac{W_{O_2}}{W_{H_2O}}$$

Ce qui donne :

$$Y_{H_2O} = n_{H_2O} \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} Y_{O_2}$$

On obtient ainsi les expressions des débits massiques d'azote et d'eau en fonction du débit massique d'oxygène :

$$\dot{m}_{N_2} = 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} \dot{m}_{O_2} \quad \text{et} \quad \dot{m}_{H_2O} = n_{H_2O} \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} \dot{m}_{O_2}$$

La vitesse des gaz frais (U) prise dans les calculs suivants est la vitesse moyennée sur toute la surface de la fente (A_f).

$$U = \frac{\dot{m}_T^v}{A_f}$$

où \dot{m}_T^v est le débit volumique total du mélange (air sec + eau + fuel). Le débit massique total ($\dot{m}_T = \rho \times \dot{m}_T^v$) est égal à la somme des débits massiques d'air sec, d'eau et de fuel ($\dot{m}_T = \dot{m}_{as} + \dot{m}_{H_2O} + \dot{m}_f$). La masse volumique du mélange carburé est égale à :

$$\rho = \frac{P}{RT_{gf}} \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}} + \frac{Y_{N_2}}{W_{N_2}} + \frac{Y_{H_2O}}{W_{H_2O}} + \frac{Y_f}{W_f} \right)^{-1} \quad (1.26)$$

L'expression de U devient :

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{\rho A_f} (\dot{m}_{O_2} + \dot{m}_{N_2} + \dot{m}_{H_2O} + \dot{m}_f) \\ &= \frac{\dot{m}_{O_2}}{\rho A_f} \left(1 + \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} n_{H_2O} + 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} + \frac{\phi}{s} \right) \end{aligned}$$

Ce qui donne :

$$\dot{m}_{O_2} = \frac{U \rho A_f}{1 + \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} n_{H_2O} + 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} + \frac{\phi}{s}} \quad (1.27)$$

$$\dot{m}_f = \frac{\phi}{s} \dot{m}_{O_2} \quad (1.28)$$

$$\dot{m}_{N_2} = 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} \dot{m}_{O_2} \quad (1.29)$$

$$\dot{m}_{H_2O} = n_{H_2O} \frac{W_{H_2O}}{W_{O_2}} \dot{m}_{O_2} \quad (1.30)$$

Le débit d'air sec est la somme du débit d'oxygène et d'azote $\dot{m}_{as} = \dot{m}_{O_2} + \dot{m}_{N_2}$. Les débitmètres utilisés sont des débitmètres massiques [$\text{ln} \cdot \text{min}^{-1}$]. L'air sec et le fuel suivent la loi des gaz parfaits et les débitmètres utilisent des normaux litres donc à une pression de $P_0 = 101325$ Pa et $T_0 = 273,15$ K.

$$\rho_f = \frac{P_0 W_f}{RT_0}; \quad \rho_{as} = \frac{P_0 W_{as}}{RT_0}$$

Ce qui donne :

$$\dot{m}_{as}^v = \frac{1}{\rho_{as}} \dot{m}_{as} = \frac{RT_0}{P_0 W_{as}} \dot{m}_{as} = \frac{RT_0}{P_0 W_{as}} (\dot{m}_{O_2} + \dot{m}_{N_2}) = \frac{RT_0}{P_0 W_{as}} \left(1 + 3,76 \frac{W_{N_2}}{W_{O_2}} \right) \dot{m}_{O_2}$$

Et,

$$\dot{m}_f^v = \frac{1}{\rho_f} \dot{m}_f = \frac{RT_0}{P_0 W_f} \dot{m}_f = \frac{RT_0}{P_0 W_f} \frac{\phi}{s} \dot{m}_{O_2} \quad (1.31)$$

La Fig 1.10 donne une représentation de l'architecture de calcul des débits ainsi que la méthode de calcul de la vitesse de flamme (expliquée dans la section suivante).

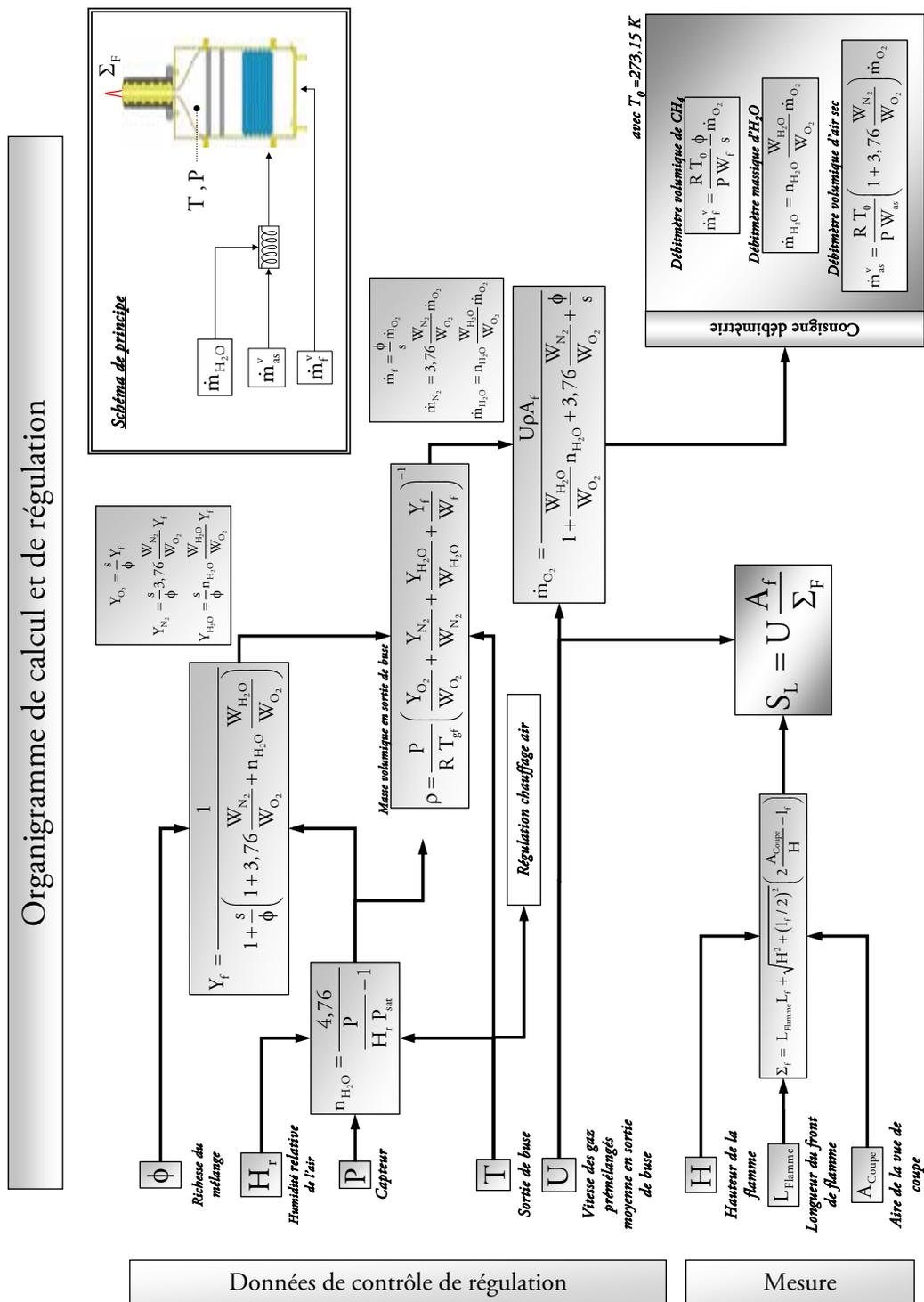


FIG. 1.10 – Organigramme de calcul et de régulation

1.3.3 Mesure de la surface de flamme

Le principe du banc expérimental est idéalement de créer une flamme bidimensionnelle de forme prismatique. Il suffit alors de connaître la surface de flamme pour obtenir la vitesse de flamme moyenne le long de la surface : le débit de gaz traversant le front de flamme est égal au débit de gaz sortant de la buse. Si on suppose que cette vitesse est une mesure de la vitesse de flamme laminaire s_L^0 , on a donc :

$$S_L = U \frac{A_f}{\Sigma_f} \quad (1.32)$$

avec U la vitesse débitante en sortie de buse, A_f aire de la section de sortie de buse et Σ_f la surface de la flamme. L'annexe A décrit une étude additionnelle publiée à MCS 6 (Mediterranean Combustion Symposium) en Juin 2009, faite en fin de thèse permettant de vérifier comment la vitesse de flamme varie le long du front de flamme. Elle montre que les variations de cette vitesse sont faibles et que la valeur moyenne de S_L (obtenue par 1.32) est très proche de la vitesse de flamme laminaire prémélangée monodimensionnelle s_L^0 .

La mesure de la surface de flamme est assurée par une caméra couplée à un programme de post traitement d'image développé au cours de cette thèse. La caméra CCD (1392×1024 pixels) effectue un capture d'une vue de coupe de la flamme. Cette image est ensuite post traitée par un programme développé sous Matlab[®] permettant de détecter le front de flamme et de calculer la surface de flamme à partir des données extraites du front de flamme.

1.3.3.1 Méthode de mesure et limitations

En théorie en sortie de buse, de section $A_f = L_f \times l_f$, la flamme doit être prismatique (Fig. 1.11). L'apparition d'effets tridimensionnels à ses deux extrémités complique la mesure de la surface de la flamme. Elle ne peut plus être exprimée simplement comme la surface d'un prisme droit mais comme la surface d'un prisme tronqué à ses deux extrémités (en bleu sur Fig. 1.11).

L'aire d'un prisme droit à base triangulaire est formulable par :

$$A_{\text{Prisme}} = 2A_{\text{Triangle}} + 2A_{\text{Rectangle}} = l_f \times H + 2L_f \sqrt{H^2 + (l_f/2)^2}$$

En revanche la formulation de l'aire d'un prisme tronqué est plus complexe et nécessite donc quelques hypothèses pour simplifier la formulation ainsi que le système de mesure.

En effet, le dispositif expérimental n'est constitué que d'une seule caméra qui regarde la flamme suivant l'axe longitudinal (axe y sur Fig. 1.11) afin d'avoir une vue de coupe de la flamme (plan x, z sur Fig. 1.11). L'image obtenue n'est pas tout à fait une coupe de la flamme, mais plutôt une vue transversale de la flamme. La caméra et son objectif sont réglés pour avoir le point focal en milieu de fente (Fig. 1.12). Cependant l'objectif a une profondeur de champ (0,1 à 30 mm suivant l'ouverture), ce qui a pour effet de produire une image intégrée du front

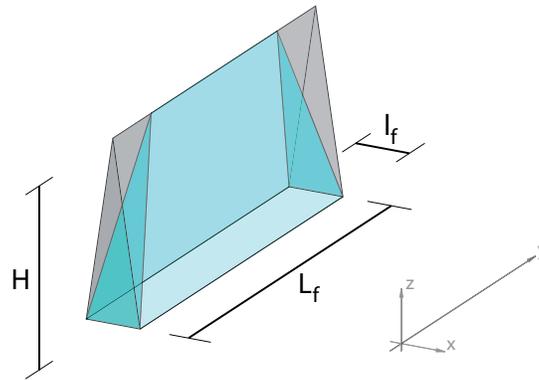


FIG. 1.11 – Formalisme de calcul de l'aire du prisme tronqué

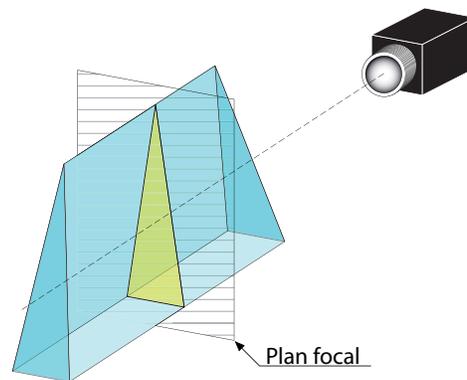


FIG. 1.12 – Métrologie pour la mesure de la vitesse de flamme

de flamme sur toute la profondeur de champ de l'objectif. Ce phénomène est à la fois favorable et défavorable. Il est bénéfique dans le sens où l'on regarde une flamme bidimensionnelle, ce qui permet d'avoir tout les gradients alignés et donc un meilleur contraste au niveau de l'image. En revanche, ce phénomène est défavorable quand la flamme n'est pas symétrique sur toute sa longueur et de multiples fronts apparaissent sur l'image. Ce phénomène est surtout visible au sommet de la flamme (Fig. 1.13) dès lors que la richesse du mélange est supérieure à 1,15.

Avec ce dispositif on peut donc mesurer, à partir de l'image obtenue, la longueur du front de flamme, sa hauteur ainsi que l'angle α (cf Fig. 1.14) que forme le front de flamme par rapport à la sortie de buse.

Il n'est pas possible de faire une mesure exacte de la surface de la flamme uniquement avec une vue transverse de la flamme car une telle vue ne permet pas d'observer les phénomènes 3D de la flamme à savoir l'angle β (cf Fig. 1.14). Pour cela une deuxième caméra serait nécessaire pour visualiser la flamme dans le plan perpendiculaire au premier. Avec les deux photos on pourrait ainsi avoir la géométrie exacte de la flamme. Cependant un tel dispositif rendrait les protocoles

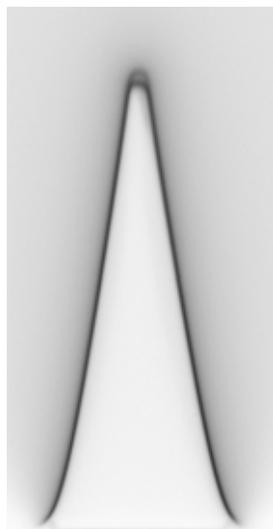


FIG. 1.13 – Apparition de fronts multiples

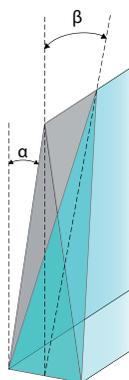


FIG. 1.14 – Extrémité du front de flamme

de mesure et de dépouillement plus complexe. On a eu donc recours à une méthode plus simple en commençant par une observation de la flamme par le côté.

La Figure 1.15 présente une photo latérale de la flamme. On peut y distinguer plusieurs phénomènes qui peuvent introduire des erreurs sur la mesure. Le premier est l'irrégularité du sommet de la flamme qui peut provoquer une image avec plusieurs fronts de flamme comme sur la photo de la Figure 1.13. Le phénomène se manifeste uniquement pour des richesses supérieures à 1,15. L'autre phénomène est le phénomène de bord visible sur la photo aux niveaux des deux extrémités de la flamme. Le bout de la flamme n'est pas composé que d'un seul plan mais de deux plans d'inclinaison différentes. La surface réelle de la flamme est donc assez complexe et ne peut être exprimée avec une formule mathématique simple. Pour résoudre ce dernier problème, on émet deux hypothèses : la première est que les extrémités de la flamme ne sont composées que



FIG. 1.15 – Image latérale de la flamme

d'un seul plan, la seconde est que l'angle β que forme ce plan par rapport au plan longitudinal (x, z sur Fig.1.11) de la fente est égal à α (Fig. 1.14). Cette hypothèse a été validée par une campagne de mesures décrite à la section 1.3.3.3.

Avec ces hypothèses l'expression de la surface de flamme devient simple et peut être calculée à partir d'une image de coupe de la flamme avec des outils de post traitement informatique comme le montre la section suivante.

1.3.3.2 Formulation de la surface de flamme

Le programme de post traitement, développé au cours de cette thèse, a pour objectif de déterminer la position du front de flamme et de calculer la vitesse de la flamme. Pour calculer la vitesse de la flamme, il faut déterminer la surface de la flamme Σ_f .

$$\Sigma_f = 2A_{\text{Triangle des extrémités}} + 2A_{\text{Trapèze}}$$

A partir de l'image en coupe de la flamme (Fig. 1.16), le programme de post traitement donne la hauteur H de la flamme, la longueur L_{Flamme} du front de flamme ainsi que l'aire A_{Coupe} de la vue de coupe de la flamme.

Le calcul de la surface de la flamme se fait de la manière suivante (Fig. 1.17) :

- La longueur du front de flamme, dans le plan de visualisation, est intégrée sur toute la longueur de la fente L_f (Fig. 1.17.a).

$$A_{\text{Rectangle}} = L_{\text{Flamme}}L_f$$

- L'aire de coupe de la flamme est corrigée avec l'angle (obtenue avec la hauteur) pour avoir l'aire des triangles des extrémités (en jaune sur Fig. 1.17.b)

$$A_{\text{Triangle des extrémités}} = A_{\text{Coupe}} \frac{\sqrt{H^2 + (l_f/2)^2}}{H}$$

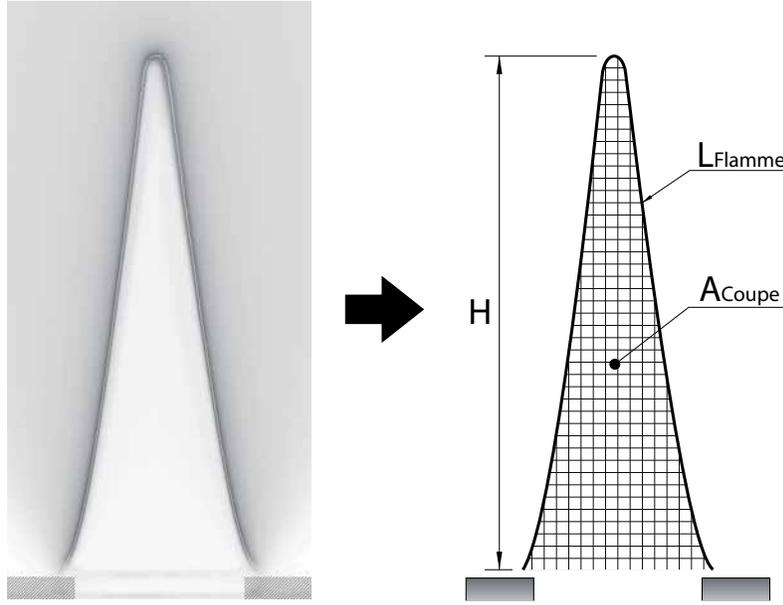


FIG. 1.16 – Post-traitement de l'image du front de flamme

- L'aire des 4 triangles à enlever aux extrémités de la flamme est obtenue à partir de la hauteur de la flamme (approximation $\alpha = \beta$) (en jaune sur Fig. 1.17.c).

$$A_{\text{Triangle de tronquage}} = \frac{l_f}{4} \sqrt{H^2 + (l_f/2)^2}$$

- La surface de la flamme (Fig.1.17) s'exprime donc avec la formule

$$\begin{aligned} \Sigma_f &= 2A_{\text{Triangle des extrémités}} + 2A_{\text{Trapèze}} \\ &= 2A_{\text{Triangle des extrémités}} + A_{\text{Rectangle}} - 4A_{\text{Triangle de tronquage}} \end{aligned}$$

Ce qui donne :

$$\begin{aligned} \Sigma_f &= 2A_{\text{Coupe}} \frac{\sqrt{H^2 + (l_f/2)^2}}{H} + L_{\text{Flamme}} L_f - l_f \sqrt{H^2 + (l_f/2)^2} \\ &= L_{\text{Flamme}} L_f + \sqrt{H^2 + (l_f/2)^2} \left(2 \times \frac{A_{\text{Coupe}}}{H} - l_f \right) \end{aligned} \quad (1.33)$$

où A_{Coupe} , L_{Flamme} , H sont issues du programme de post traitement et où l_f et L_f sont respectivement la largeur et longueur de la fente (Fig. 1.11).

1.3.3.3 Validation de la méthode de calcul

Pour tester la validité des hypothèses émises précédemment, une campagne de test a été effectuée avec 2 caméras, à différentes conditions de fonctionnement (vitesse de l'écoulement, richesse

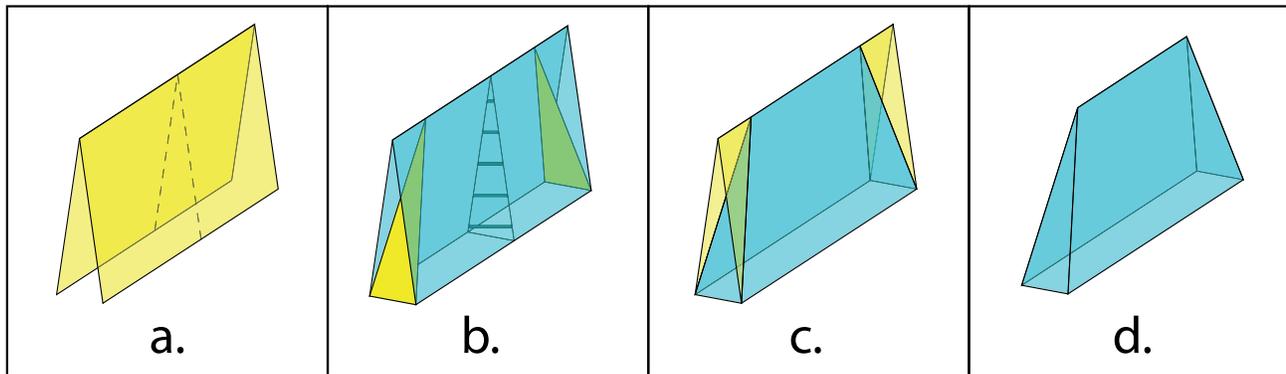


FIG. 1.17 – Méthode de calcul de la surface totale de la flamme

Richesse	Surface exacte (mm ²)	Surface avec approximation (mm ²)	Erreur approximation
0,8	7575	7798	2,9%
0,85	6516	6685	2,6%
0,9	5949	6132	3,1%
0,95	5511	5659	2,7%
1	5229	5374	2,8%
1,05	5152	5313	3,1%
1,1	5165	5333	3,2%
1,15	5447	5639	3,5%
1,2	5951	6132	3,0%

TAB. 1.3 – Résultat pour l'approximation sur le calcul de la surface de flamme

du mélange). Avec les 2 images il est ainsi possible d'obtenir la surface réelle de la flamme sans approximation. La méthode de calcul avec approximation comparée avec la méthode des 2 images (sans approximation) montre que l'erreur, introduite par les différentes approximations exposées précédemment est de 3% en moyenne. Le Tableau 1.3 donne un exemple de comparaison entre ces deux méthodes pour un point de fonctionnement ($U = 1,7 \text{ m.s}^{-1}$; $T = 300 \text{ K}$ et $H_R = 0\%$).

1.3.4 Suppression des instabilités de combustion

Depuis les travaux de Rijke en 1859 [76], on sait qu'une caractéristique des configurations comme celles étudiées ici, est leur capacité à développer des instabilités de combustion. Ces instabilités se manifestent sous la forme d'oscillations de la flamme couplées aux modes acoustiques du plenum d'alimentation et peuvent mener à des flashbacks spectaculaires et dangereux. Ces

mécanismes ont été rencontrés au cours de cette thèse et ont généré de puissantes instabilités. Ces oscillations ont été maîtrisées par un changement de la longueur de la buse d'alimentation. On sait en effet [26, 27, 78] que ces flammes agissent comme un excitateur du mode de Helmholtz du plenum en amont de la fente de sortie où la flamme est accrochée si le temps de retard de la flamme est dans la gamme adéquate. En allongeant la buse d'injection, il est possible de modifier la fréquence de Helmholtz et donc de devenir stable.

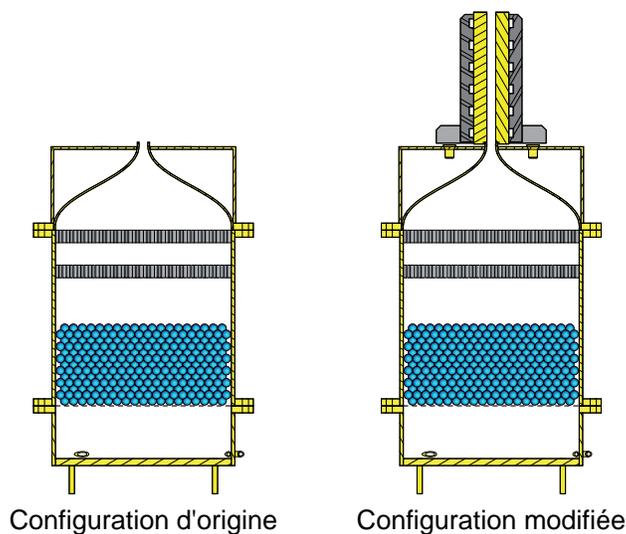


FIG. 1.18 – Les deux configurations étudiées : à gauche, configuration d'origine (ORIG) avec buse courte. A droite : configuration modifiée (MODIF) avec buse longue. C'est la seconde qui est employée en standard dans le reste de cette thèse, car elle permet d'éviter les instabilités de combustion et les flashback.

A titre d'exemple, la figure 1.19 montre un signal de pression instationnaire pour deux configurations appelées ORIG et MODIF détaillées sur la figure 1.18. On constate qu'avec la buse d'origine, un mode de pression instationnaire violent se développe. La figure 1.21 montre quelques positions instantanées du front de flamme pendant ces oscillations : soumises à de fortes oscillations de la vitesse d'éjection des buses, la flamme est fortement instationnaire et présente un mode à 86 Hz : la figure 1.20 présente les spectres de pression pour les configurations ORIG et MODIF. On observe bien une disparition des oscillations sur le cas MODIF. On voit également que le mode à 86 Hz est accompagné par d'autres modes. On retrouve ici des topologies de flammes typiques des instabilités de flamme laminaire avec des formes proches des flammes « pagode » observées au laboratoire EM2C⁵ par exemple. Ces instabilités empêchent bien sûr toutes mesures de vitesse de flamme. De plus ces oscillations mènent le plus souvent à un flashback. Avec la buse modifiée (MODIF), ce mode disparaît et la flamme reste stationnaire. L'objectif de

⁵Laboratoire d'Énergétique Moléculaire et Macroscopique, Paris, France

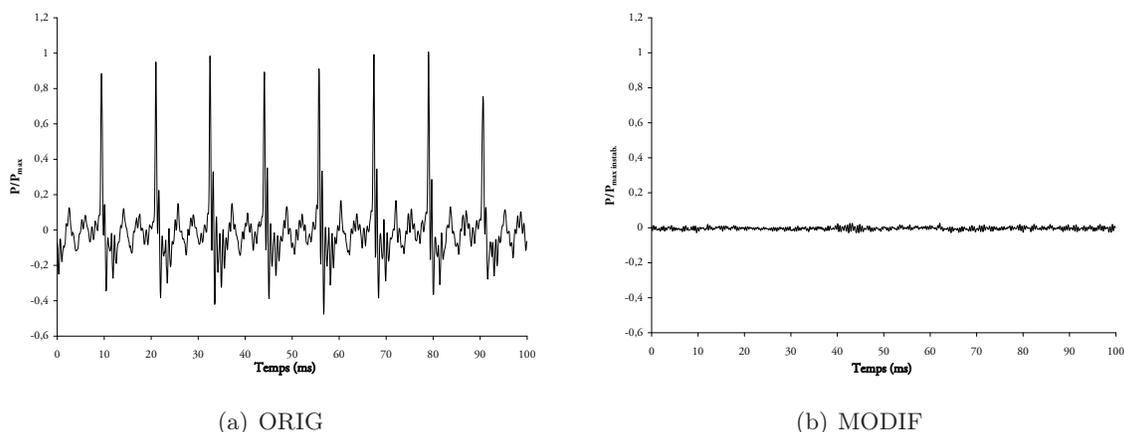


FIG. 1.19 – Évolution de la pression pour les deux configurations ORIG (à gauche) et MODIF (à droite).

cette thèse n'étant pas l'étude des instabilités, on s'est contenté ici de supprimer ce mécanisme sans l'étudier en détail, comme décrit ci dessous.

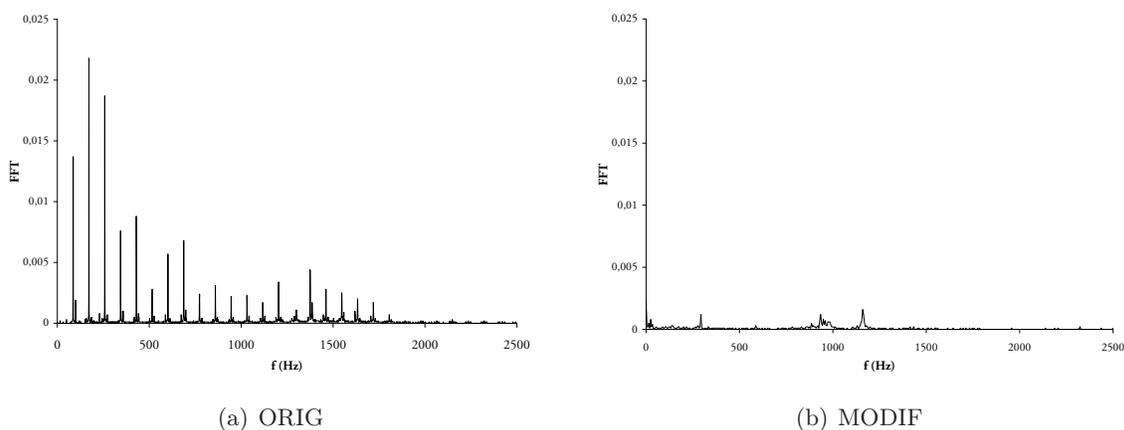


FIG. 1.20 – Spectre du signal de pression pour les deux configurations ORIG (à gauche) et MODIF (à droite).

L'existence d'instabilités dans des brûleurs de géométrie similaire à celui étudié ici et leur contrôle ont été étudiés par exemple par Noiray et al [64] au laboratoire EM2C. Bien que la géométrie EM2C (un réseau de flammes axisymétriques) soit différente de la configuration de l'IMFT, leurs conclusions peuvent être directement utilisées. En particulier, Noiray et al montrent que deux critères sont nécessaires pour qu'une flamme stabilisée sur un réservoir de grand volume terminé par une fente de longueur donnée soit instable :

- le temps de retard τ entre une perturbation de vitesse à la sortie de la buse et

une perturbation de taux de réaction [74] doit être tel que $\tau > t/2$ où t est la période du mode acoustique excité,

- le flux acoustique généré par cette flamme instable doit être plus grand que l'amortissement acoustique qui vient ici principalement des pertes par viscosité dans la fente.

Il n'est pas question de répéter ici l'étude de Noiray et al mais on peut en utiliser un résultat très simple : même si la flamme a un temps de retard τ qui la rend instable, il est possible de la stabiliser en augmentant la hauteur de la buse. En effet le terme d'amortissement acoustique dans la fente varie linéairement avec cette hauteur. Afin de supprimer les instabilités observées dans notre système, il suffit donc d'augmenter la hauteur de la buse liant le plenum au plan où la flamme est accrochée. On a donc rallongé cette partie en y ajoutant une buse de hauteur à ajuster. Cette modification a permis d'éliminer les instabilités et de mesurer les vitesses de flamme sans difficulté.

Plusieurs hauteurs de buse ont dû être testées (50, 100 et 150 mm) pour éliminer ces instabilités. Suivant la hauteur de la buse, le domaine de stabilité de la flamme ainsi que sa fréquence de résonance sont modifiés. Lorsqu'il n'y a pas de buse, la flamme est instable quel que soit le point de fonctionnement $[U; \phi; H_R]$. Dès que l'on rajoute une buse, la flamme redevient stable sur un certain domaine de stabilité mais celui-ci change suivant la hauteur de la buse. Comme prévu par le critère de Noiray *et al.* [64] la stabilité augmente avec la hauteur de buse. Pour une buse de 50 mm seuls quelques points de fonctionnement permettent d'avoir une flamme stable (régime pauvre). Pour une buse de 100 mm de hauteur, la flamme est stable sur toute la gamme possible de points de fonctionnement au méthane à $T = 300$ K et à humidité nulle. Une hauteur de buse de 150 mm a été choisie pour la configuration définitive du brûleur afin d'effectuer, par la suite, des mesures pour d'autres mélanges dont la vitesse de flamme est supérieure à celui du cas méthane-air (mélange H₂ / CH₄ par exemple fait dans le cadre d'un programme de recherche).

1.3.5 Evaluation des marges d'erreurs

1.3.5.1 Evaluation théorique de l'effet de l'étirement

La flamme utilisée ici est courbée à son sommet et étirée sur ses côtés. Elle est donc soumise à un étirement variable (voir Eq. 1.10) qu'il est difficile d'estimer avec précision. Des simulations directes faites à un nombre de Lewis $Le_F = 1$ [72] montrent que la vitesse de consommation reste constante le long d'une flamme de type bec Bunsen et suggère que l'effet de l'étirement reste faible dans ce cas (Fig. 1.22).

Il est clair cependant que quand le nombre de Lewis (Le_F) n'est pas égal à un, des effets importants apparaissent, visibles à l'oeil nu comme l'ouverture du sommet de la flamme, un mécanisme montrant un effet clair de l'étirement [53]. Dans le cas des mesures faites ici, on peut s'attendre à voir des effets du nombre de Lewis dépendant de la richesse puisque le réactif déficient ne sera pas le même pour les cas pauvres et riches.

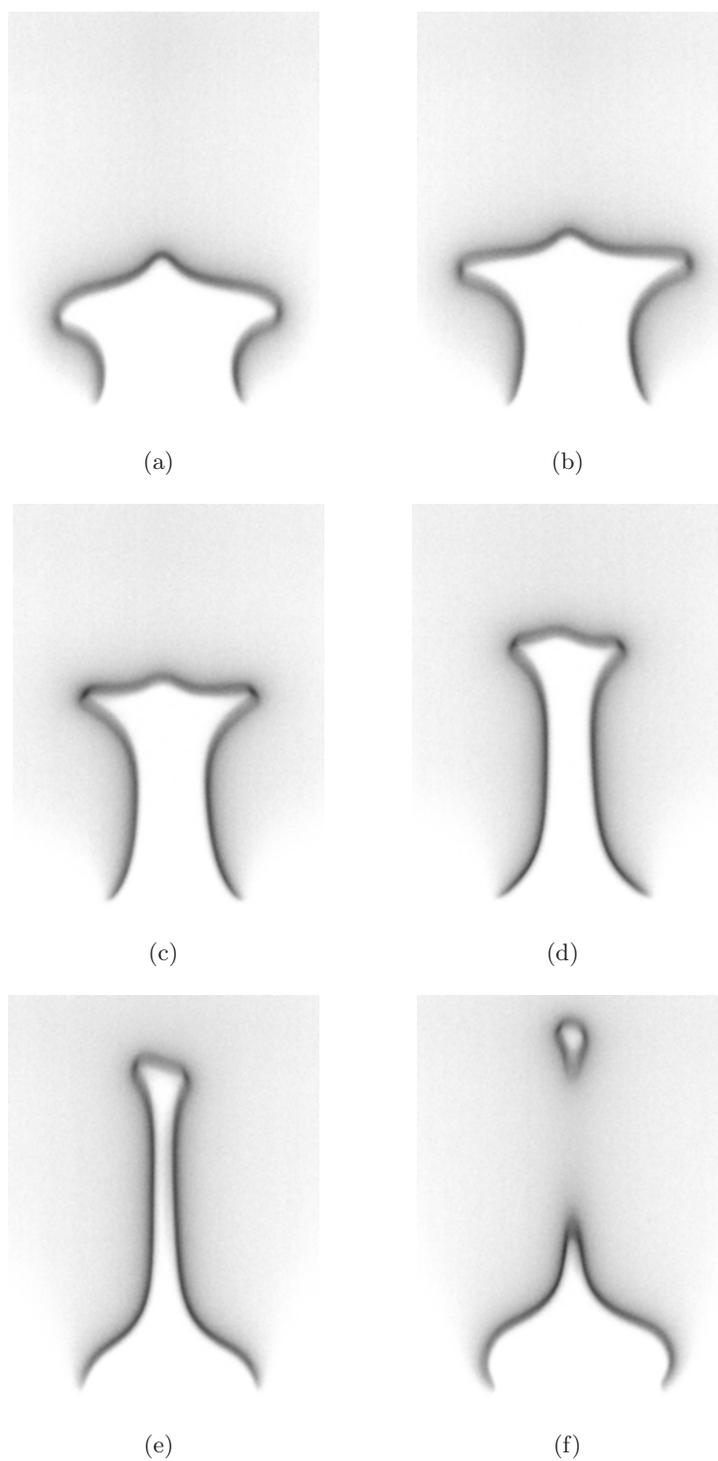


FIG. 1.21 – Visualisation du front de flamme instantané à différents instants (aléatoires) pour la configuration ORIG. Fréquence d'oscillation = 86.0 Hz

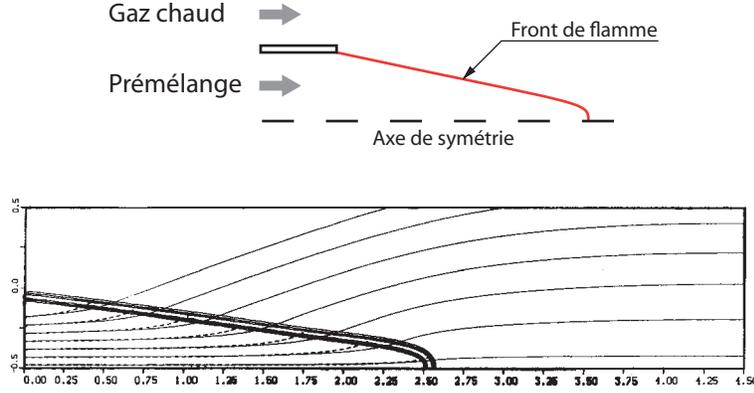


FIG. 1.22 – Simulation directe d’une flamme de type bec Bunsen pour $Le_F = 1$ [72]. Isocontours de taux de réaction : ils sont parfaitement équidistants et la vitesse de consommation est la même en tous points de la flamme.

On peut construire une estimation théorique Δs_c de l’effet maximum de l’étirement sur la vitesse de flamme à partir de l’équation (1.11) :

$$\frac{\Delta s_c}{s_L^0} = \frac{s_c - s_L^0}{s_L^0} = -\frac{\mathcal{L}\kappa}{s_L^0} = -M_a^c \frac{\delta_L^0}{R} \frac{U}{s_L^0} \quad (1.34)$$

où l’étirement a été évalué sur la partie rectiligne du front où le gradient de vitesse a été supposé égal à U/R dans lequel U est la vitesse de sortie et R la demi-largeur de la fente de sortie. Cette valeur est largement sur-évaluée car la flamme est quasiment alignée avec les lignes de courant et ne subit donc pas un gradient de vitesse aussi grand. En pratique, le nombre de Markstein associé à la vitesse de consommation (M_a^c) est inférieur à l’unité, U/s_L^0 est inférieur à 4 dans notre cas et l’épaisseur de flamme est de l’ordre de 0,1 mm alors que R vaut 5 mm. On arrive donc à des valeurs de $\frac{\Delta s_c}{s_L^0}$ de l’ordre de 2 à 3% au maximum, ce qui reste raisonnable.

1.3.5.2 Evaluation expérimentale de l’effet de l’étirement

Une autre façon de vérifier les effets de l’étirement est de faire des mesures de vitesse de flamme pour un cas fixé (richesse et température) en faisant varier la vitesse de sortie de la buse U . Ceci est aussi une vérification globale de la méthode. La Fig. 1.23 présente un résultat de mesure de vitesse de flamme S_L pour un cas où la richesse vaut 0,9, pour différentes valeurs de la vitesse de sortie U . On constate que la vitesse de sortie des gaz frais en sortie de buse n’influence pas les mesures de vitesse de flamme (moins de 1%).

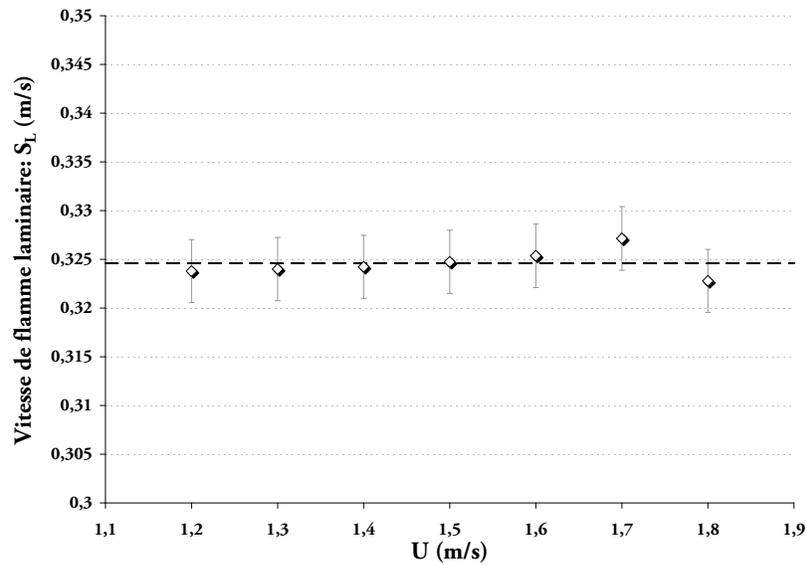


FIG. 1.23 – Mesure de la vitesse de flamme pour différentes valeurs de la vitesse moyenne de sortie des gaz U au niveau de la buse d'éjection (avec barre d'erreur de 1%).

1.3.5.3 Erreurs de mesure

a. Formulation de l'erreur de mesure

Au cours de ce travail, on mesure la vitesse de la flamme s_c à partir de la vitesse moyenne en sortie de buse U , de l'aire de la fente en sortie de buse A_f et de la surface de la flamme Σ_f .

La surface de flamme Σ_f est mesurée à partir d'une image numérisée du front de flamme (voir section 1.3.3). Plusieurs erreurs sont ainsi introduites. Tout d'abord, cette mesure donne une surface de flamme visible correspondant aux radicaux émettant dans cette gamme et pas forcément à la surface où le taux de réaction se produit. Compte tenu de la faible épaisseur du front, cette erreur reste probablement négligeable. Une seconde source d'erreurs provient de la méthode employée pour déterminer la surface de la flamme (section 1.3.3). Trois effets doivent être considérés :

- Effets de bords tridimensionnels : la conception du brûleur visait à créer une flamme bidimensionnelle. Cependant aux deux extrémités du brûleur, il existe une zone où des effets tridimensionnels apparaissent (voir section 1.3.3.2).
- Accrochage de la flamme sur les lèvres : il n'est pas clair que la flamme commence à brûler exactement sur les lèvres de la fente d'injection. Cette zone contient donc éventuellement des éléments de flamme non actifs qui ne devraient pas être comptés dans Σ_f .
- Méthode géométrique : la section 1.3.3 montre que la mesure est effectuée en supposant que la flamme est un prisme tronqué aux deux extrémités, ce qui n'est pas

exactement le cas.

Les effets de bords ont été pris en compte explicitement dans la section 1.3.3 et l'équation 1.33 inclue une correction liée à la combustion ayant lieu sur les faces latérales de la flamme en V inversée. L'effet des extinctions locales aux lèvres de la fente est plus difficile à quantifier mais est étudié numériquement dans l'annexe A. Les parois de la buse d'injection restent à température élevée mais pas suffisamment pour que la flamme s'y accroche. Il existe donc certainement un facteur d'atténuation de la combustion dans cette zone que nous avons appelé η (Eq. 1.36). Ce paramètre sera supposé constant pour toutes les mesures.

$$\Sigma_f = \frac{\Sigma_{mesure}}{\eta} \quad (1.35)$$

Ce qui donne pour la mesure de la vitesse de flamme

$$s_c = \frac{\eta U A_f}{\Sigma_{mesure}} \quad (1.36)$$

Ce facteur de correction η est introduit pour tenir compte des erreurs systématiques de mesure. Ces erreurs sont liées par exemple à la méthode de visualisation mais aussi au fait que l'ensemble du front de flamme n'est pas actif : près des lèvres de la buse, la flamme est localement éteinte. Il a été décidé de prendre en compte toutes ces corrections en un seul facteur η dont la valeur sera fixée plus loin et maintenue constante dans toutes les mesures. L'erreur de mesure sur s_c est donnée par la relation suivante :

$$\frac{\Delta s_c}{s_c} = \frac{\Delta U}{U} - \frac{\Delta \Sigma_f}{\Sigma_f}$$

La vitesse moyenne U est une donnée de contrôle du banc. Elle peut être exprimée en fonction du débit total \dot{m}_t et de la densité ρ du mélange en sortie de buse.

$$U = \frac{\dot{m}_t}{\rho A_f}$$

Ce qui donne pour l'erreur de mesure sur U :

$$\frac{\Delta U}{U} = \frac{\Delta \dot{m}_t}{\dot{m}_t} - \frac{\Delta \rho}{\rho}$$

Le débit total \dot{m}_t est la somme du débit d'air, du débit de méthane et du débit d'eau.

$$\dot{m}_t = \dot{m}_{as} + \dot{m}_f + \dot{m}_{H_2O}$$

Tous ces débits sont imposés et mesurés par des débitmètres dont les erreurs sont données par le constructeur. Ce qui donne pour l'erreur de mesure de \dot{m}_t :

$$\frac{\Delta \dot{m}_t}{\dot{m}_t} = \frac{\Delta \dot{m}_{as}}{\dot{m}_{as}} + \frac{\Delta \dot{m}_f}{\dot{m}_f} + \frac{\Delta \dot{m}_{H_2O}}{\dot{m}_{H_2O}}$$

La densité ρ dépend de la composition des gaz à la sortie de la buse, de la température de sortie T_S (supposée homogène) et de la pression P :

$$\rho = \frac{P}{rT_s} \quad \text{avec} \quad r = \frac{R}{W} \quad \text{et} \quad W = \sum_k X_k W_k$$

où X_k est la fraction molaire de l'espèce k , W_k sa masse molaire et R la constante universelle des gaz parfaits. L'erreur sur ρ est donc :

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\Delta P}{P} - \frac{\Delta T_s}{T_s}$$

Ce qui donne pour s_c :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta s_c}{s_c} = & \left(\frac{\Delta \dot{m}_{as}}{\dot{m}_{as}} + \frac{\Delta \dot{m}_f}{\dot{m}_f} + \frac{\Delta \dot{m}_{H_2O}}{\dot{m}_{H_2O}} \right) \\ & - \left(\frac{\Delta P}{P} - \frac{\Delta T_s}{T_s} \right) - \frac{\Delta \Sigma_f}{\Sigma_f} \end{aligned} \quad (1.37)$$

On obtient finalement comme erreur de mesure sur s_c :

$$\frac{|\Delta s_c|}{s_c} = \frac{|\Delta \dot{m}_{as}|}{\dot{m}_{as}} + \frac{|\Delta \dot{m}_f|}{\dot{m}_f} + \frac{|\Delta \dot{m}_{H_2O}|}{\dot{m}_{H_2O}} + \frac{|\Delta P|}{P} + \frac{|\Delta T_s|}{T_s} + \frac{|\Delta \Sigma_f|}{\Sigma_f} \quad (1.38)$$

où $\Delta \Sigma_f$ dépend de la précision des mesures de H , A_{Coupe} et L_{Flamme} (voir Fig. 1.16). $\Delta \Sigma_f$ est donné par (au 1^{er} ordre)

$$\frac{\Delta \Sigma_f}{\Sigma_f} = \frac{\Delta H}{H}$$

car H est la quantité qui contrôle la valeur de Σ_f à travers l'aire des trapèzes. ΔH est faible et dépend de la résolution de la caméra. Typiquement $\frac{\Delta H}{H} \leq 1\%$.

b. Calcul de l'erreur de mesure

La précision des débitmètres Bronhorst[®] est donnée par le constructeur (Table 1.4) : elle est exprimée en fonction de la valeur lue (VL) et de la pleine échelle (PE). Afin de simplifier les calculs, on considère que les débitmètres d'air et de méthane sont utilisés respectivement, en moyenne, à 75% et 50% de leur pleine échelle et que le débitmètre d'eau est utilisé, en moyenne, à 30% de sa pleine échelle. Ces approximations permettent ainsi d'exprimer l'erreur de mesure directement en fonction des débits mesurés.

La pression est mesurée par un capteur de pression Keller[®] donné pour une précision de $\pm 0,5\%$ de la pleine échelle qui est de 0-2 bar. Le banc expérimental fonctionnant à pression atmosphérique (1,013 bar), l'erreur de mesure sur la pression est donc 1%.

Les températures sont mesurées par des thermocouples qui ont une précision de 3 K. Les températures moyennes mesurées sont de l'ordre de 300 K, ce qui donne une erreur de mesure sur les températures de 1%.

Débitmètre	Précision	Pleine échelle	Erreur de mesure
Air	± 0,8% VL + ± 0,2% PE	100 nl.min ⁻¹	1%
Méthane	± 0,5% VL + ± 0,1% PE	19,05 nl.min ⁻¹	0,7%
Eau	± 1% PE	1000 g.h ⁻¹	3%

TAB. 1.4 – Précision des débitmètres

La température de sortie T_S est mesurée par un thermocouple avec une précision de 3 K mais le champ de température en sortie de buse n'est pas homogène. En éteignant la flamme après 30 minutes d'opération et en mesurant immédiatement la température on obtient les résultats de la figure 1.24 pour un point de fonctionnement à 300 K (température des gaz frais et température de régulation du système de refroidissement de la buse à 300 K).

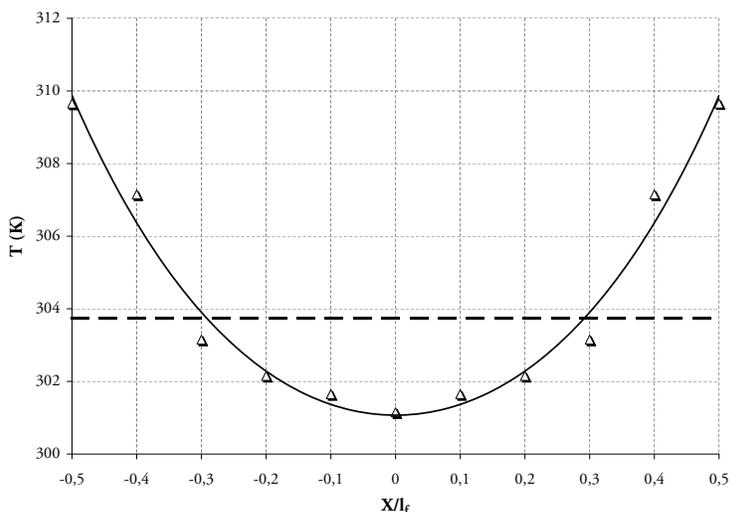


FIG. 1.24 – Profil de température transverse (suivant X Fig. 1.25) en sortie de buse. La valeur moyenne de température est indiquée sur la figure.

Cette figure montre que le champ de température n'est pas parfaitement plat. La température du mélange monte à 310 K sur les bords de la fente ce qui suggère que les parois métalliques de la buse atteignent une température du même ordre de grandeur ou supérieure en fonctionnement. Cependant, ce champ de température reste raisonnablement homogène. On notera que l'équation (1.36) ne nécessite pas que le profil de vitesse soit homogène : elle exprime uniquement la conservation du débit et est valide pour tout profil de sortie. Par contre, il faut que la température de sortie T_S soit homogène si on veut que la vitesse de flamme soit la même partout. La figure 1.24 montre que l'air carburé entrant dans la flamme n'est pas parfaitement isotherme et pourrait mener à des variations locales de S_L . En fait les variations de T sont de moins de 10 K. La vitesse

de flamme CH_4/Air dépend de la température des gaz frais sous la forme [74] :

$$\frac{S_L}{S_L^0} = \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\alpha_T}$$

avec $\alpha_T = 1,612$ pour un mélange stœchiométrique. Ce qui mènerait donc à une variation maximum de S_L de 5%. En fait ceci n'est pas observé et a été vérifié dans la simulation numérique faite en annexe A : la zone très proche des parois est en fait éteinte et très limitée en taille ce qui limite fortement son effet.

La valeur absolue de T_S est connue à quelques Kelvins près si on la mesure à chaque expérimentation. On peut donc estimer que $\frac{\Delta T_S}{T_S} = 3/300 = 0,01$.

En résumé cela donne :

Terme	Expression	Erreur relative
Débit Air Sec	\dot{m}_{as}	1%
Débit Méthane	\dot{m}_f	0,7%
Débit Eau	$\dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}$	3% (0% en air sec)
Pression	P	1%
Température	T_s	1%
Surface de flamme	Σ_f	1%

TAB. 1.5 – Tableau récapitulatif des différentes erreurs de mesure

L'erreur de mesure sur la vitesse de flamme est donc, d'après l'Eq. 1.38, de 8% en air chargé en eau et 5% en air sec.

1.3.6 Caractérisation du champ de vitesse en sortie de fente

Dans la configuration d'origine du brûleur (Fig. 1.18) le dernier composant était le convergent destiné à obtenir une vitesse constante sur toute la section de sortie. Cependant les instabilités de combustion (cf section 1.3.4) nous ont conduit à rajouter une buse après le convergent. La méthode de mesure de vitesse de flamme utilisée dans ces travaux (section 1.3.3) n'est pas dépendante du profil de vitesse en sortie de buse, mais uniquement du débit volumique.

Le brûleur bec Bunsen est conçu pour mettre en œuvre une flamme laminaire prémélangée de forme prismatique. Une des hypothèses émises pour pouvoir effectuer les mesures de vitesse de flamme, sur ce banc expérimental, est l'uniformité du profil de vitesse en sortie de buse suivant son axe longitudinal (Y sur Fig. 1.25). Si une dissymétrie du profil de vitesse apparaît dans la longueur de la buse, alors la flamme deviendra aussi dissymétrique. Une dissymétrie peut mener à des apparitions de front de flamme double sur l'image d'acquisition (Fig 1.13).

Il est donc nécessaire de qualifier et quantifier la vitesse des gaz frais en sortie de buse. Ces mesures ont été effectuées par anémométrie à fil chaud. Pour plus de détails sur cette technique de mesure le lecteur peut consulter les références [8, 77].

1.3.6.1 Méthode de mesure

Le système de mesure est un boîtier StreamLine de Dantec Dynamics® additionné d'un module CTA (*Constant Temperature Anemometry*), le tout couplé à un ordinateur de pilotage. Le fil chaud utilisé pour ces mesures a pour diamètre 10 μm . Le déplacement est assuré par une table à mouvement croisé de 0,05 mm de précision. Afin d'assurer une bonne précision pour le calcul de débit total, les mesures sont faites au pas de 0,25 mm dans le sens de la largeur de la fente (X sur Fig. 1.25). Les mesures pour les profils de vitesse longitudinal (dans la longueur de la fente Y sur Fig. 1.25) sont effectuées tout les 2 mm. La sonde est positionnée à 0,5 mm au dessus de la buse.

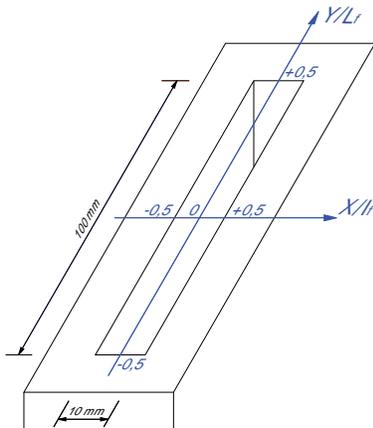


FIG. 1.25 – Repère X/Y pour les mesures de vitesse en sortie de buse

Il est important de reproduire les mêmes conditions expérimentales lors de ces tests que pendant un fonctionnement standard pour pouvoir interpréter les résultats obtenus. Cependant les mesures de vitesse au fil chaud sont uniquement possibles avec un mélange de gaz ininflammable, ainsi l'alimentation de méthane du brûleur est remplacée par une alimentation d'air comprimé. Cette modification permet ainsi de garder les mêmes conditions opératoires (débit volumique en sortie de buse) que dans le cas méthane/air.

1.3.6.2 Profil de vitesse

La forme générale des profils de vitesse dépend peu du débit passant à travers la buse. Un seul cas de vitesse débitante est donc présenté ici, les autres vitesses débitantes menant aux mêmes conclusions. Le cas choisi représente des conditions opérationnelles standard du brûleur

en fonctionnement méthane, à savoir une vitesse débitante de $1,5 \text{ m.s}^{-1}$ et une température des gaz frais de 300 K pour différentes richesses. La richesse ne représente dans ces mesures qu'une répartition du débit d'air dans les deux débitmètres (d'air et de méthane), car le débit total en sortie de buse, ne change pas. En changeant la richesse on ne modifie donc que le rapport des débits au niveau des débitmètres.

La Fig. 1.26 présente des profils de vitesse, en sortie de buse pour un point de fonctionnement $U = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$, $Y = 0$ (milieu de fente dans sa longueur) à différentes valeurs de richesse. En première constatation, le profil de vitesse n'est pas plat mais approximativement parabolique ce qui correspond à un écoulement de Poiseuille établi. Dans la configuration d'origine (pas de buse) le profil de vitesse en sortie de fente aurait dû être plat, mais l'adjonction d'une buse de 150 mm de haut entraîne l'épaississement des couches limites de l'écoulement. Ceci n'a aucune influence sur la méthode utilisée pour mesurer les vitesses de flamme puisque la mesure est basée sur la surface de flamme et pas sur son angle, contrairement par exemple à Mazas *et al.* [60] qui utilisent un profil de vitesse plat et mesurent l'angle de la flamme. Par contre la diminution de vitesse de l'écoulement en proche paroi explique le phénomène de courbure sur la base de la flamme. En effet comme l'écoulement est plus lent en proche paroi, la flamme a tendance à remonter au sein de la buse, entraînant un étirement de la flamme à sa base. Il est aussi à remarquer sur cette figure que le profil de vitesse n'est que très peu influencé par la modification de la richesse. L'intégration des profils sur la largeur de la fente montre une variation de moins de $0,5\%$ par rapport au cas $\Phi = 1,0$. Pour les maximums de vitesse, leur variation n'est que de $0,3\%$ maximum.

La Fig. 1.27 représente des profils de vitesse, en sortie de buse pour un point de fonctionnement $U = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$, $\Phi = 1,0$ à différentes valeurs de Y (position dans la longueur de la fente). Les profils de vitesse, à différentes positions de la fente, gardent la même forme mais leurs maximums diffèrent légèrement : au fur et à mesure que l'on s'éloigne du centre de la fente le maximum de vitesse diminue. Cette atténuation reste cependant assez faible, en effet l'intégration des profils sur la largeur de la fente montre une variation de moins de $1,5\%$ par rapport au milieu de la fente ($Y = 0$).

Afin de confirmer la tendance observée sur la figure précédente, des mesures de profils de vitesse ont été effectuées dans le sens longitudinal de la fente en $X = 0$. La Fig. 1.28 présente les résultats obtenus pour un point de fonctionnement $U = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$ à différentes valeurs de richesse. La légère décroissance observée sur la Fig. 1.27 se retrouve sur ces profils longitudinaux de vitesse. Cette décroissance reste inférieure à $2,0\%$ sur 70% de la fente et seuls les 15 premiers ou derniers millimètres ont une atténuation plus grande due aux couches limites de l'écoulement. L'intégration du profil de vitesse sur la longueur de la fente montre une variation de moins de $0,2\%$ quelle que soit la richesse du mélange, ce qui est très faible.

Il a été donc démontré ici que ni la richesse, ni la position sur la partie centrale de la fente

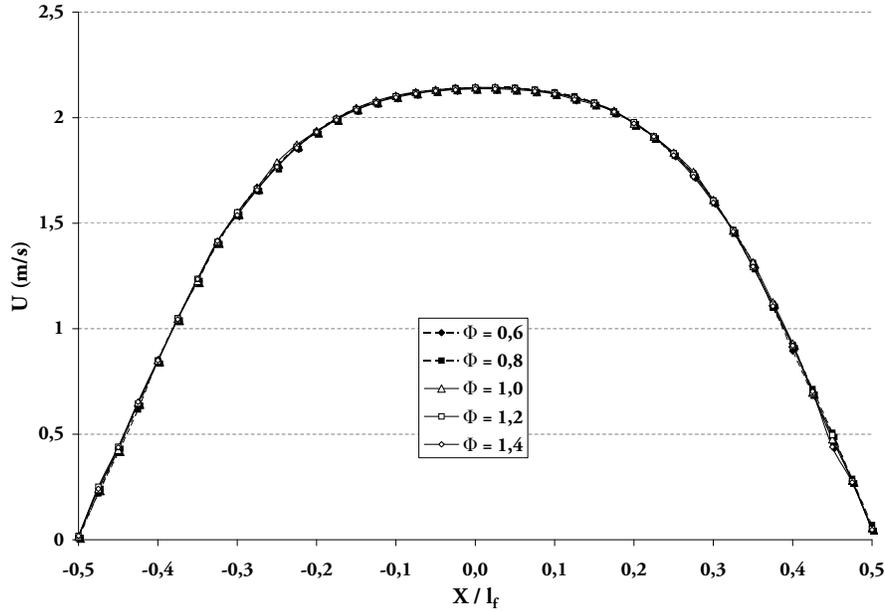


FIG. 1.26 – Profils transversaux de vitesse en sortie de buse pour un point de fonctionnement $U = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$, $Y = 0$ pour différentes valeurs de richesse.

($-0,35 < Y < +0,35$ hors couche limite) n’influent sur les profils de vitesse.

1.3.6.3 Contrôle de la débitmétrie

Les mesures à l’anémomètre à fil chaud permettent aussi de remonter jusqu’au débit d’air passant par la buse. Cette mesure est donc utilisée pour valider le calcul de débit (cf section 1.3.2.4).

Le débit volumique d’un gaz traversant une surface peut s’exprimer de la façon suivante :

$$\dot{Q}_v = \int_{\Sigma} U \, dA = \int_x \int_y U \, dx \, dy = \int_y \left[\int_x U dx \right] dy \quad (1.39)$$

Ou encore :

$$\dot{Q}_v = U_{moyen} \, A_{fente} \quad (1.40)$$

où U_{moyen} est la vitesse débitante à travers toute la surface de la fente et A_{fente} l’aire de la fente. En couplant l’Eq. 1.39 et l’Eq. 1.40, on obtient l’expression de la valeur moyenne de la vitesse en fonction des vitesses locales :

$$U_{moyen} = \frac{1}{A_{fente}} \int_y \left[\int_x U dx \right] dy \quad (1.41)$$

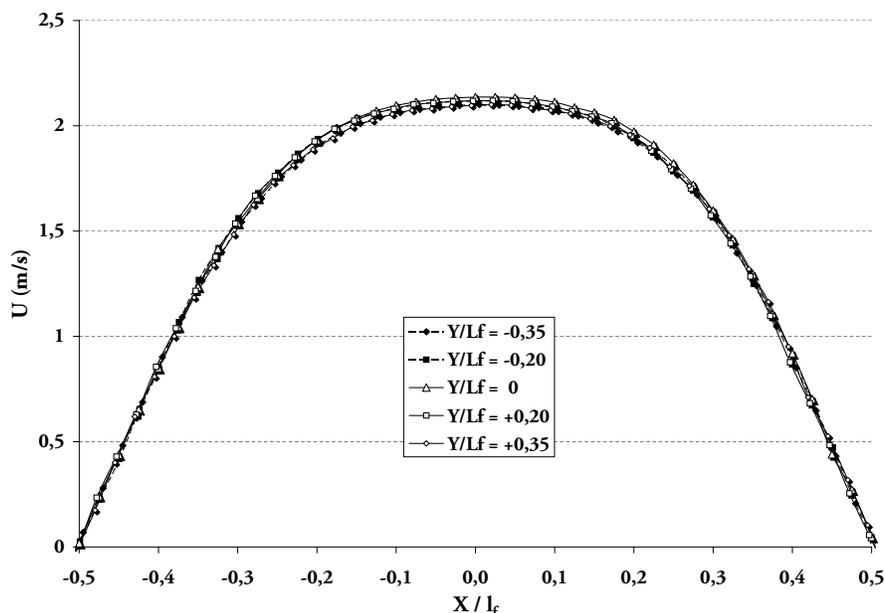


FIG. 1.27 – Profils transversaux de vitesse en sortie de buse pour un point de fonctionnement $U = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$, $\Phi = 1$ pour différentes valeurs de Y/L_f (Fig. 1.25).

L'Eq. 1.41 permet donc à partir des profils de vitesse de remonter jusqu'au débit volumique en sortie de buse. Les résultats obtenus par les mesures fil chaud sont en accord avec la consigne donnée au banc expérimental. En effet dans le cas où la consigne de vitesse débitante est de $1,5 \text{ m.s}^{-1}$, la mesure du débit par l'intermédiaire de l'anémomètre à fil chaud donne $1,478 \text{ m.s}^{-1}$ soit une différence inférieure à 1,5%. Cette différence est égale à la précision de cette méthode de mesure et on peut donc conclure que le débit mesuré en sortie est égal au débit de consigne.

1.3.7 Evaluation a posteriori de la précision des mesures et choix du paramètre de correction η

Les sections précédentes ont permis d'évaluer les barres d'erreur a priori pour la vitesse de flamme. Cette section fournit une évaluation a posteriori de la méthode en l'appliquant à un cas connu. Elle permet aussi de caler le facteur de correction η (Eq. 1.36). On mesure ici la vitesse de flamme pour un mélange CH_4 -Air (donc sec) et on compare les résultats à ceux de la littérature et du calcul. Comme référence, on a employé les mesures suivantes :

- Les mesures expérimentales de Gu *et al.* [34], Van Maaren *et al.* [93], Vagelopoulos [92] et Dong *et al.* [23],
- Un calcul numérique fait avec COSILAB[®] et le schéma GRI-Mech 3 [19, 30]. Ces outils sont décrits plus en détail dans la section 1.1.

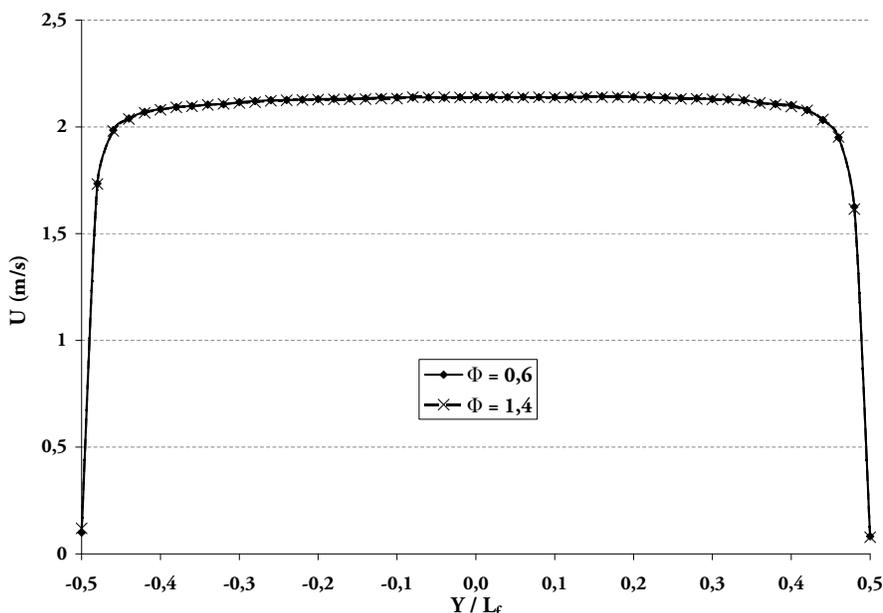


FIG. 1.28 – Profil longitudinal de vitesse en sortie de buse pour un point de fonctionnement $U = 1,5 \text{ m.s}^{-1}$, $T = 300 \text{ K}$, $X = 0$ (Fig. 1.25) pour différentes valeurs de la richesse.

La figure 1.29 montre tout d’abord la comparaison entre nos mesures et le calcul COSILAB[®] (voir section suivante). Le facteur η est fixé ici à 1,06. On constate que l’accord mesure/calcul est très bon quel que soit la richesse. Les mesures faites sur le bec Bunsen suivent très bien les calculs COSILAB[®] même du côté riche.

On peut alors comparer ces résultats avec ceux de la littérature. Sur la figure 1.30, on constate un bon accord entre nos résultats et ceux obtenus par 3 méthodes expérimentales différentes issues de la littérature. Sur cette figure, on peut aussi observer la dispersion habituelle des mesures expérimentales de vitesse de flamme, qui correspond à l’état de l’art dans le domaine. On peut donc considérer que notre méthode est raisonnablement précise et peut être employée pour mesurer l’effet de l’humidité. La validité du facteur de correction η a été vérifiée pour différentes richesses, humidités et températures des gaz frais. Le facteur η restera constant pour toutes les mesures à venir.

Les résultats exposés ici ont été obtenus en seconde année de thèse. En fin de 3^{ème} année, l’ensemble de la méthode de mesure a été revu à la lumière d’une simulation numérique et un autre post processing a été proposé pour calculer la vitesse de flamme dans le dispositif expérimental. L’ensemble de ces résultats est fourni en annexe A. Il mène à des valeurs quasiment identiques pour s_L^0 et n’est donc pas décrit ici. Il permet aussi de déterminer de façon exacte le facteur $\eta = 1,06$ et d’expliquer d’où il provient.

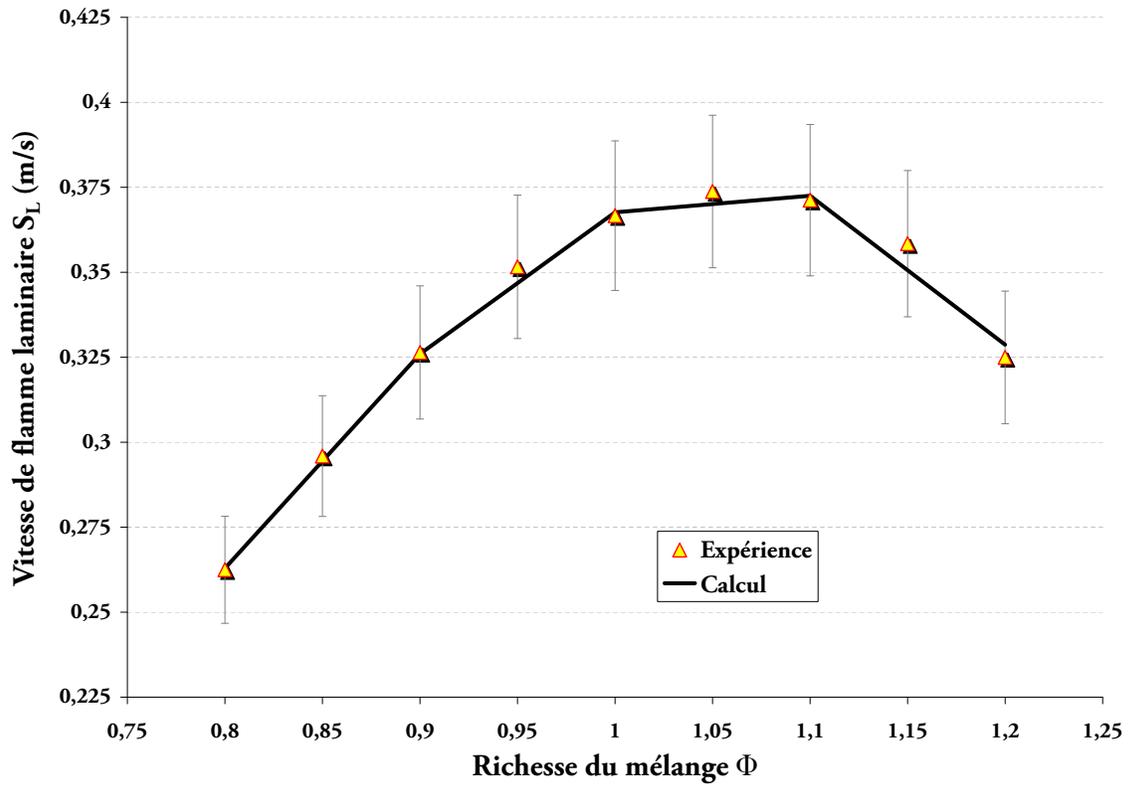


FIG. 1.29 – Comparaison calcul COSILAB[®] (avec GRI-Mech 3.0)/mesure bec Bunsen pour un mélange CH₄/Air à $T = 300$ K, $P = 1$ bar.

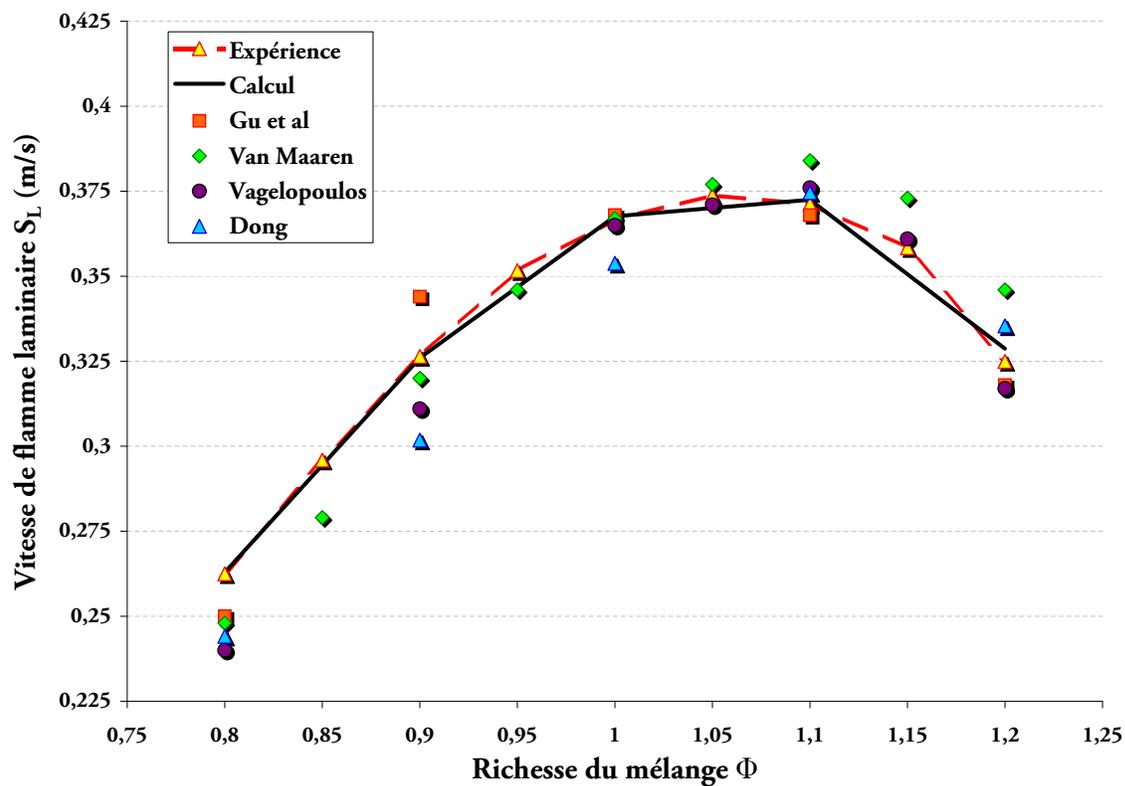


FIG. 1.30 – Mesures de vitesse de flamme laminaire : comparaison de nos résultats (numériques et expérimentaux) avec les résultats expérimentaux de Gu *et al.* [34], Van Maaren [93], Vagelopoulos [92] et Dong *et al.* [23].

Chapitre 2

Les effets de H_2O sur une flamme laminaire prémélangée

Ce chapitre présente les résultats obtenues à partir des outils numériques et expérimentaux présentés dans le chapitre précédent sur les effets de H_2O sur la vitesse de flamme laminaire. La première partie est consacrée à la comparaison des résultats expérimentaux et numériques sur la vitesse de flamme laminaire dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée air/méthane à une pression à 1 bar afin de valider le comportement du schéma numérique vis à vis de l'ajout de vapeur d'eau dans les gaz frais. La seconde partie traite des effets de l'ajout d'eau sur d'autres grandeurs telles que la température adiabatique de fin de combustion ou encore certaines émissions polluantes (HC , NO_x ,...) et ce à partir des résultats numériques. Ensuite l'étude porte sur les effets de l'humidité lorsque que l'on augmente la température des gaz frais pour pouvoir augmenter la proportion d'eau dans les gaz frais (augmentation de pression de saturation de l'eau dans l'air). Puis l'étude se penche sur ces tendances lors d'une compression isentropique des gaz frais comme c'est le cas dans un moteur à piston.

2.1 Définition de la gamme d'humidité

Aussi bien sur le plan expérimental que sur le plan numérique, il n'est pas possible ou nécessaire de monter à un taux d'humidité très important dans les gaz frais : ceci n'a pas d'intérêt car si l'eau se retrouve en très grande quantité dans les gaz brûlés la combustion disparaît totalement.

Dans la pratique tant que la température des gaz frais reste inférieure à la température de saturation à la pression considérée, la teneur maximale de vapeur d'eau dans l'air est fixée par la pression saturante de l'eau. Une fois cette teneur dépassée un phénomène de condensation apparaît et des gouttes d'eau liquide se forment. Dans le cas du banc expérimental présenté dans le chapitre précédent, il y a une limitation maximale et une minimale à l'ajout d'eau

dans les gaz frais. La limitation maximale est l'apparition de condensation d'eau sur les parois. Les canalisations de fluides sont isolées thermiquement mais l'enceinte du brûleur ne l'est pas entièrement : les parois du brûleur (mélangeur et tranquillisateur sur Fig. 1.2) se retrouvent ainsi à une température légèrement inférieure à celle du gaz. Dès que la teneur en eau du mélange se rapproche de sa valeur maximale, de la condensation apparaît sur ces parois. Ce phénomène se manifeste quand l'humidité relative du mélange approche 80%. La limitation basse d'ajout d'eau dans les gaz frais est due à la partie matériel et plus particulièrement à la régulation du débit d'eau (voir section 1.3.2.2). L'organe de régulation du débit est une vanne à pointeau intégrée dans le débitmètre-régulateur. Ce type de vanne a pour inconvénient que son ouverture est conditionnée par une consigne minimale. C'est donc cette consigne qui est responsable de la limitation basse d'ajout d'eau. Dans le cas de la température des gaz frais à 300 K, cette limitation ne permet pas d'obtenir un point de fonctionnement stable du débit liquide pour une humidité relative inférieure à 30%.

En revanche il est tout à fait possible de monter la fraction massique d'eau dans les gaz frais jusqu'à 1 (gaz frais composés uniquement d'eau) de façon numérique. Cependant un tel cas conduirait à l'extinction de la flamme dans un cas réel. Ainsi une limite de l'humidité spécifique a été fixée suite aux résultats numériques obtenus sur les vitesses de flamme laminaire : cette limite est $s_H = 250 \text{ g.kg}^{-1}$. En effet pour des fractions massiques d'eau importantes ($Y_{\text{H}_2\text{O}}=0,240$ pour $s_H = 250 \text{ g.kg}^{-1}$ dans le cas $\phi=1$) la vitesse de flamme laminaire dans le cas du méthane atteint des valeurs inférieures à 6 cm.s^{-1} (section 2.4.1) ce qui est déjà très faible.

La Fig. 2.1 représente la fraction massique de fuel en fonction de la fraction massique de vapeur d'eau en trait continu. Le calcul correspond à une richesse de 1,0 pour le mélange sec avant introduction de l'eau. Le trait discontinu horizontal représente la limite de flammabilité basse du méthane, à savoir une richesse de 0,6 pour une humidité nulle. Le trait discontinu vertical représente l'humidité spécifique maximale qui sera utilisée dans les calculs numériques, soit $s_H = 250 \text{ g.kg}^{-1}$. Il est à remarquer qu'à cette limite de s_H , la fraction massique d'eau $Y_{\text{H}_2\text{O}}$ est 5,7 fois supérieure à la fraction massique de fuel Y_{CH_4} (Fig. 2.2). Cependant, dans ce cas précis, la fraction massique de CH₄ reste supérieure à la limite d'extinction pauvre en air sec (Fig.2.1). On peut donc supposer qu'on n'observera pas non plus d'extinction tout au moins dans le cas stoechiométrique.

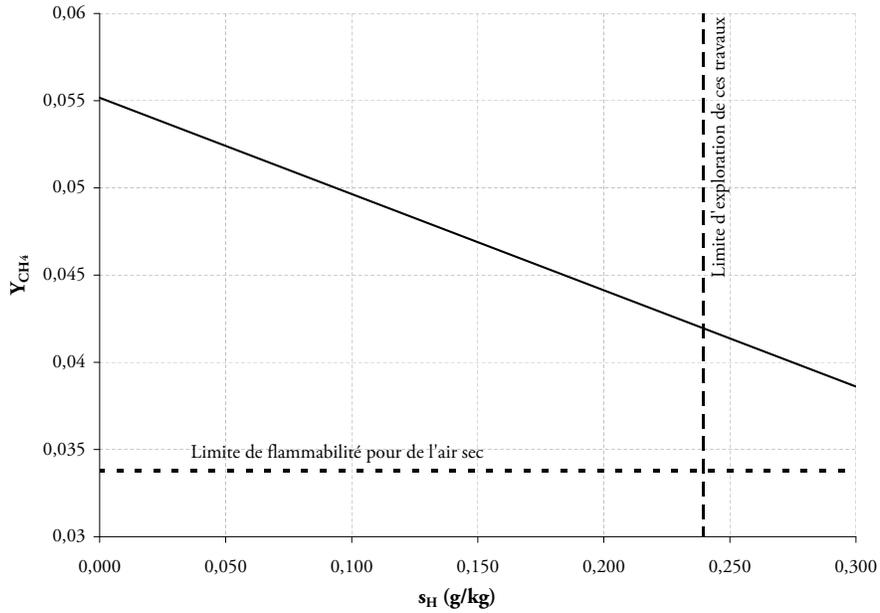


FIG. 2.1 – Fraction massique de méthane dans un mélange air/méthane/eau en fonction de la fraction massique de vapeur d'eau pour une richesse de 1,0.

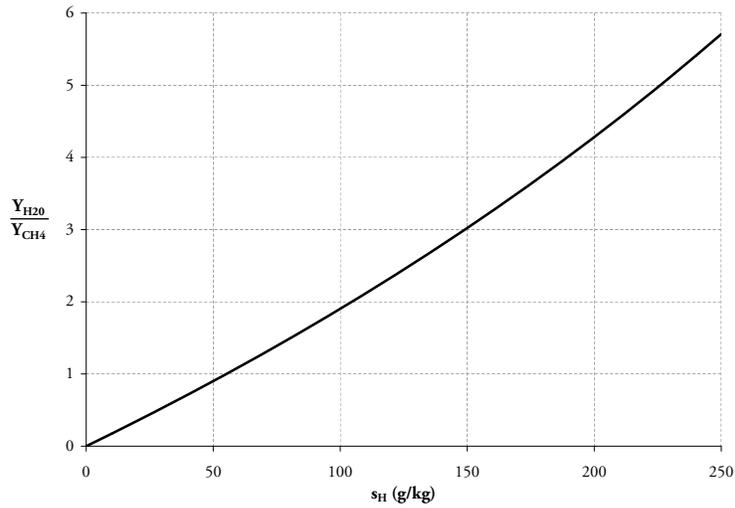


FIG. 2.2 – Rapport de la fraction massique d'eau au fuel en fonction de l'humidité spécifique de l'air pour une richesse de 1,0.

2.2 Etude expérimentale et numérique des effets de H₂O sur la vitesse de flamme à 1 bar

Le schéma cinétique chimique (GRI-Mech 3.0 [30]) utilisé pour faire ces calculs a été validé pour de nombreux cas, mais aucun de ces cas ne traitent de l'ajout de vapeur d'eau dans les gaz frais. Pour valider ce schéma cinétique il est indispensable de réaliser une comparaison des résultats obtenus de celui-ci avec des résultats obtenus expérimentalement dans les mêmes conditions opératoires. La comparaison des deux méthodes est réalisée pour des conditions opératoires standards, c'est à dire à une température des gaz frais de 300 K et à pression atmosphérique. Puis dans un second temps la comparaison des deux méthodes est effectuée pour une autre température des gaz frais à savoir 330 K. Le paramètre permettant la comparaison de ces deux méthodes est la vitesse de flamme laminaire prémélangée car ce paramètre reflète bien la cinétique chimique de la combustion. En effet la vitesse de flamme dépend des vitesses des réactions chimiques de chaque réaction, ainsi que des échanges thermiques se produisant entre toutes les espèces mises en jeu durant le processus de combustion. Le schéma cinétique GRI-Mech 3.0 étant un schéma complet, il est raisonnable de penser que si la vitesse de flamme donnée par ce schéma est en accord avec des résultats expérimentaux alors le schéma réactionnel mis en jeu décrit bien le processus complet la combustion. De même les résultats numériques obtenus sur d'autres paramètres doivent être en accord avec des mesures expérimentales. La validation du schéma cinétique de GRI-Mech dans le cas de l'ajout d'eau dans les gaz frais est donc réalisée sur la vitesse de flamme laminaire comme variable de sortie.

2.2.1 Température des gaz frais 300 K

La Fig. 2.3 représente les résultats obtenus expérimentalement (symbole " Δ ") et numériquement (trait continu) pour un mélange stœchiométrique à $T_{gf} = 300$ K. Le premier point à remarquer est le très bon accord entre les résultats expérimentaux et numériques : l'écart entre ces deux méthodes est inférieur à 2%. Le schéma GRI-Mech reproduit bien la vitesse de flamme laminaire dans le cas d'ajout de vapeur d'eau dans les gaz frais. Le second point à noter sur cette figure est la diminution de la vitesse de flamme laminaire au fur et à mesure que l'humidité spécifique de l'air augmente. Cette diminution est de 13,6% lorsque s_H passe de 0 à 21,8 g.kg⁻¹ (soit de 0 à 100% d'humidité relative à 300 K). A titre de comparaison, cette diminution de vitesse de flamme due à l'augmentation de s_H équivaut à une diminution de S_L causée par une diminution de 30 K des gaz frais. Cette diminution ne doit pas être sans conséquence dans le fonctionnement d'un moteur à piston. Si la vitesse de flamme diminue de 13,6% la durée de combustion dans le cycle moteur sera augmentée de 13,6%. Les performances moteurs devraient elles aussi être modifiées par cette baisse de vitesse de flamme laminaire même si d'autres facteurs comme le plissement du front, dû à la turbulence, entrent en jeu. Ceci sera testé sur un moteur réel au

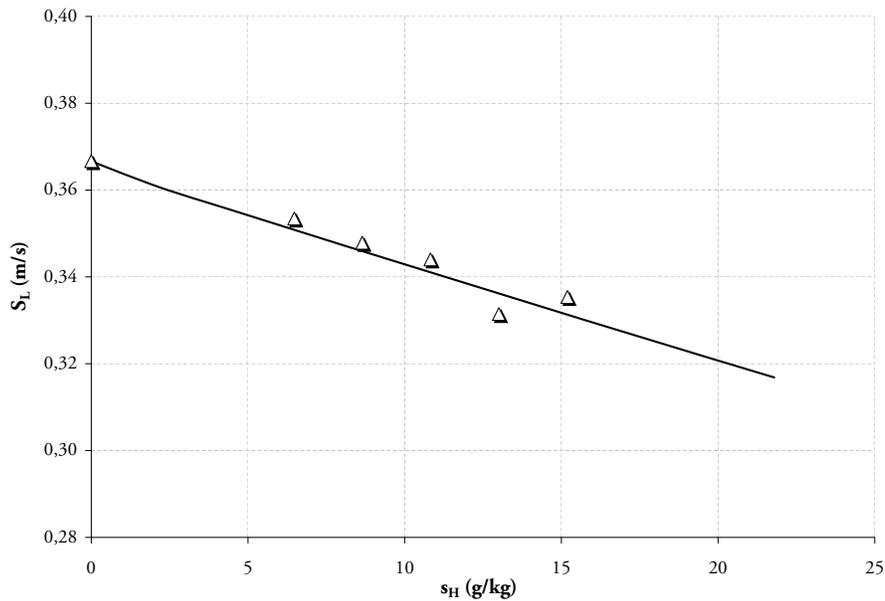


FIG. 2.3 – Effet de s_H sur la vitesse de flamme laminaire à $\phi = 1,0$ et $T_{gf} = 300$ K. Légende : " Δ " Données expérimentales ; "-" Résultats numériques

chapitre 3.

La cohérence entre les deux méthodes pour le calcul de la vitesse de flamme laminaire a été testée dans le cas d'une flamme stoechiométrique. Pour des mélanges pauvres, riches ou à la stoechiométrie, les réactions chimiques mises en jeu diffèrent durant la combustion et valider le schéma de cinétique chimique à la stoechiométrie ne suffit donc pas. La Fig. 2.4 représente les résultats obtenus par les deux différentes méthodes, expérimentale (symbole " Δ , \diamond , \circ " sur le graphique) et numérique (lignes sur le graphique), pour 3 humidités spécifiques (allant de 0 à 15,2 g.kg⁻¹) en fonction de la richesse du mélange. Là encore on note le très bon accord entre les deux méthodes : la vitesse de flamme laminaire obtenue expérimentalement en fonction de la richesse à 3 humidités différentes concorde avec la vitesse de flamme laminaire obtenue numériquement. Le second point à remarquer est que l'effet de l'humidité sur la vitesse de flamme se conserve quelle que soit la richesse du mélange.

Le schéma de cinétique chimique est maintenant validé avec la vitesse de flamme laminaire dans le cas où la température des gaz frais est de 300 K à une pression de 1 bar. L'hypothèse qui est posée est que si GRI-Mech donne la bonne vitesse de flamme laminaire prémélangée alors les autres variables de sortie sont considérées comme exactes. Ainsi, l'étude des effets de l'ajout de vapeur d'eau sur une flamme dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée à $T_{gf} = 300$ K et $P = 1$ bar peut être poursuivie de façon numérique.

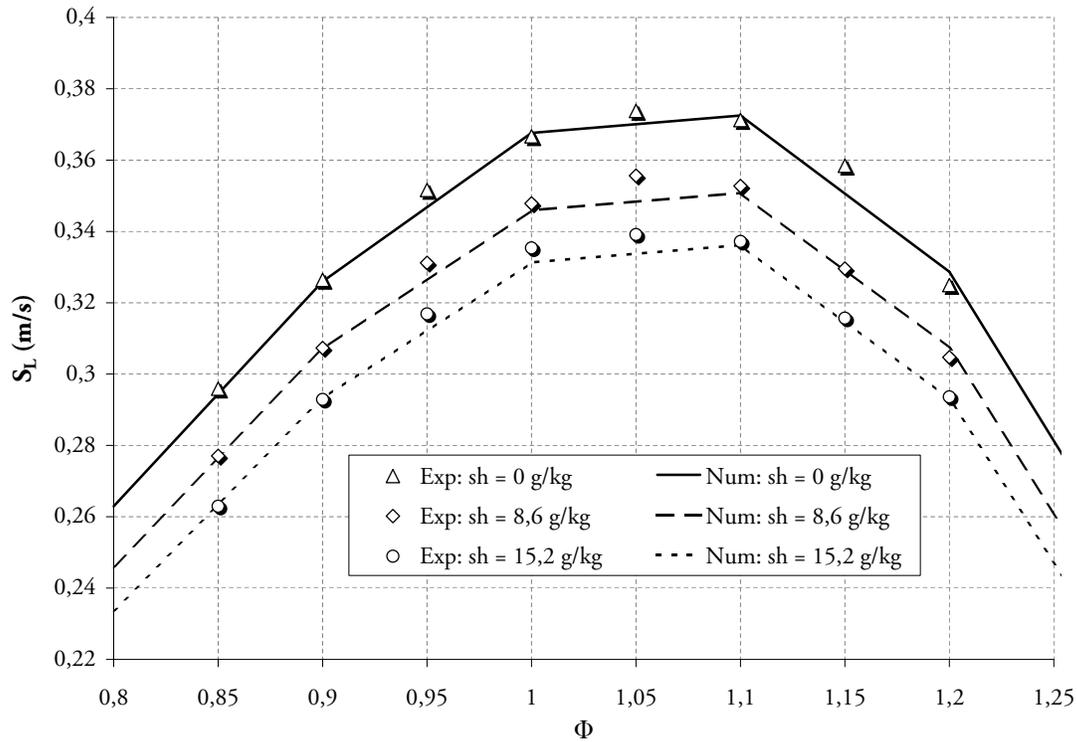


FIG. 2.4 – Effet de la richesse ϕ sur la vitesse de flamme laminaire à $T_{gf} = 300$ K pour 3 différentes humidités spécifiques. Légende : " Δ , \diamond , \circ " Données expérimentales (Exp) ; "Ligne" Données numériques (Num)

2.2.2 Température des gaz frais 330 K

La Fig. 2.5 représente les résultats obtenus expérimentalement (symboles " Δ " et " \diamond ") et numériquement (lignes) pour un mélange stœchiométrique pour une température des gaz frais de 330 K. Les résultats obtenus à 300 K (Fig. 2.3) ont été ajoutés comme référence.

On peut remarquer que les résultats obtenus de façon numérique et expérimentale sont en accord pour les deux températures des gaz frais. Augmenter l'humidité spécifique s_H fait baisser la vitesse de flamme S_L et la pente dS_L/ds_H est sensiblement la même à 300 et 330 K. Par contre, il est possible d'atteindre des niveaux de s_H plus élevés quand l'air est chaud (330 K) car la saturation ($H_r = 100\%$) est atteinte pour des valeurs de s_H plus grandes. La diminution de S_L est alors spectaculaire : pour une humidité de 100 g.kg^{-1} , la vitesse de flamme S_L a baissé de $42,5$ à $20,8 \text{ cm.s}^{-1}$: un moteur à piston fonctionnant dans un pays tropical (330 K, saturation totale en eau) peut donc voir la vitesse de flamme baisser de moitié : cet effet devrait se traduire directement par une réduction de puissance et une nécessité de changer l'avance à l'allumage.

Le très bon accord entre les deux méthodes, expérimentale et numérique, permet de valider

le schéma de cinétique chimique dans le cas d'une température des gaz frais de 300 et 330 K. Une des hypothèses fixées maintenant est que le schéma cinétique GRI-Mech, étant valide pour le domaine 300-330 K, reste aussi valide sur un plus grand domaine de température des gaz frais. Cette hypothèse est raisonnable, car de nombreuses études ont validé le schéma cinétique pour différents paramètres d'entrée (P , T , ϕ) dans de plus grands domaines que ceux explorés dans le cadre de cette étude [86, 88].

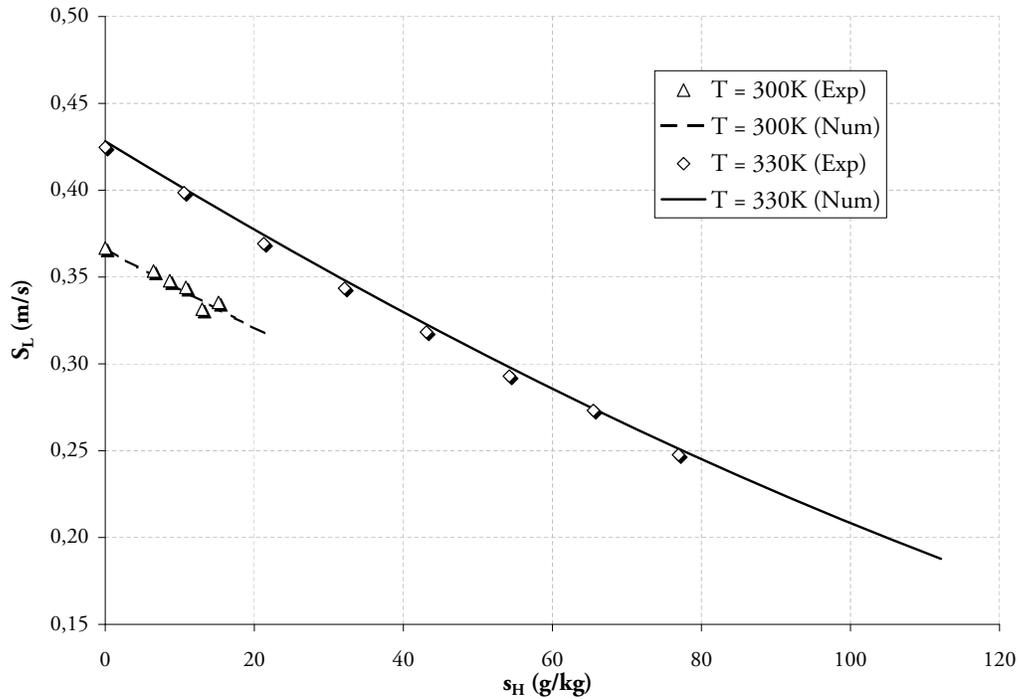


FIG. 2.5 – Effet de s_H sur la vitesse de flamme laminaire à $\phi = 1,0$ pour $T_{gf} = 300$ et 330 K. Légende : " Δ " et " \diamond " Données expérimentales ; "Ligne" Résultats numériques.

2.3 Etude numérique de l'effet de H₂O à 1 bar et 300 K

L'étude de l'humidité de l'air sur la vitesse de flamme laminaire a montré une diminution de S_L lors d'une augmentation de l'humidité des gaz frais. En revanche l'expérimentation de l'IMFT ne permet pas d'étudier quels sont ses effets sur d'autres paramètres tels que la température adiabatique de fin de combustion, les émissions polluantes ou encore sur un carburant liquide comme l'isooctane. Tous ces effets vont être maintenant étudiés numériquement.

2.3.1 Vitesse de flamme laminaire prémélangée

La Fig. 2.6 représente les vitesses de flamme laminaire prémélangée air/méthane et air/isoctane ayant comme température des gaz frais 300 K et une richesse de 1,0. Pour les deux carburants l'ajout d'eau dans les gaz frais a pour conséquence de diminuer la vitesse de flamme laminaire prémélangée. Le passage d'un air sec à un air à 300 K saturé en eau provoque une diminution de S_L de 0,045 m.s⁻¹ dans le cas du méthane et de 0,025 m.s⁻¹ dans le cas de l'isoctane. Cette diminution est donc moins prononcée dans le cas de l'isoctane comme on peut le voir la Fig. 2.7. L'humidité de l'air a moins d'effet sur l'isoctane que sur le méthane en ce qui concerne S_L .

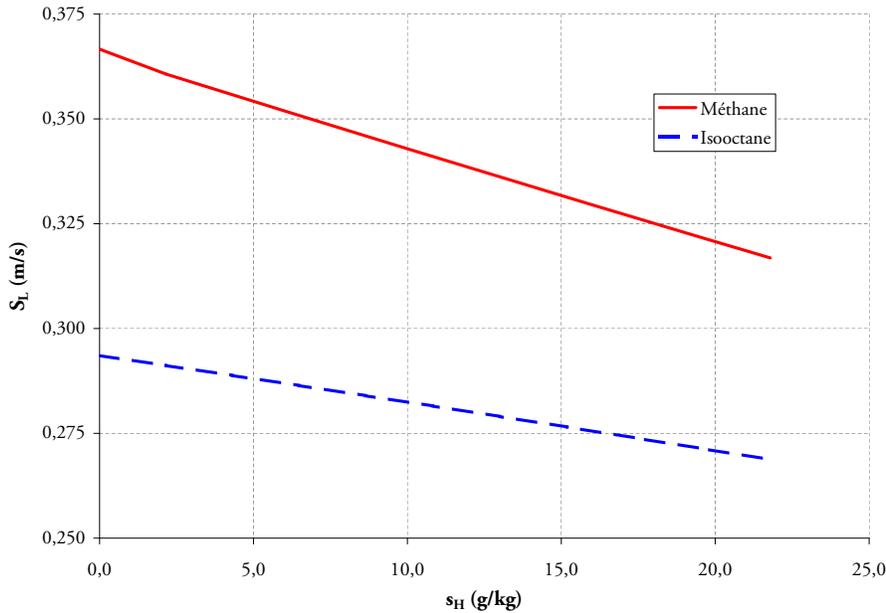


FIG. 2.6 – Effet de s_H sur la vitesse de flamme laminaire prémélangée à $T_{gf} = 300$ K et $\phi=1,0$.

L'ajout d'eau dans les gaz frais a donc pour effet de diminuer la vitesse de flamme laminaire. Nous attribuerons ce phénomène aux effets de dilution et de modification de la capacité calorifique du mélange des gaz frais. L'étude de Dlugogorski *et al.* [22] a montré la faible importance des modifications de la chimie engendrées par H₂O sur S_L dans le cadre des flammes prémélangées.

2.3.2 Température adiabatique de fin de combustion

La température adiabatique de fin de combustion (T_{adiab}) est un paramètre important de la combustion car elle détermine la quantité de chaleur dégagée par la flamme et agit aussi sur les mécanismes de formation des polluants. Toutes modifications de celle-ci entraîne donc des modifications sur d'autres variables. La Fig. 2.8 représente l'évolution de la température adiabatique de fin de combustion en fonction de l'humidité spécifique s_H et cela pour une température des

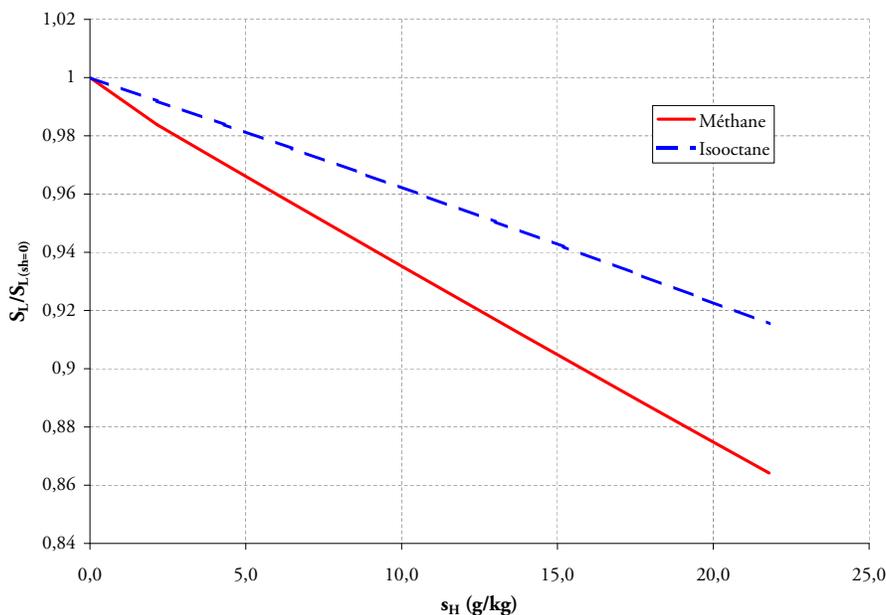


FIG. 2.7 – Effet de s_H sur la vitesse de flamme laminaire prémélangée adimensionnée par sa valeur à humidité nulle ($s_H = 0 \text{ g.kg}^{-1}$) pour un point de fonctionnement à $T_{gf} = 300 \text{ K}$ et $\phi=1,0$.

gaz frais de 300 K à une richesse de 1,0 pour du méthane et de l'isooctane. Le point à remarquer sur cette figure est la diminution de T_{adiab} lors de l'augmentation de l'humidité spécifique. Cette diminution est de 50 K pour les deux mélanges allant de l'air sec à un air totalement saturé en eau. L'ajout de vapeur dans les gaz frais a donc pour effet de diminuer la température adiabatique de fin de combustion.

La Fig. 2.9 représente l'évolution de T_{adiab} adimensionnée (par sa valeur à humidité nulle) en fonction de l'humidité spécifique de l'air à une température des gaz frais de 300 K et $\phi = 1,0$. L'effet de s_H sur T_{adiab} est du même ordre pour du méthane ou pour de l'isooctane.

L'ajout de vapeur dans les gaz frais a donc pour effet de diminuer la température adiabatique de fin de combustion pour les deux types de carburant : méthane et isooctane. La baisse de cette température est imputable aux 3 phénomènes que sont : la dilution, la capacité calorifique et la chimie. Les deux premiers effets font baisser la température adiabatique de fin de combustion, alors que la troisième a tendance à l'augmenter [42, 67], l'effet global reste cependant une diminution de cette température.

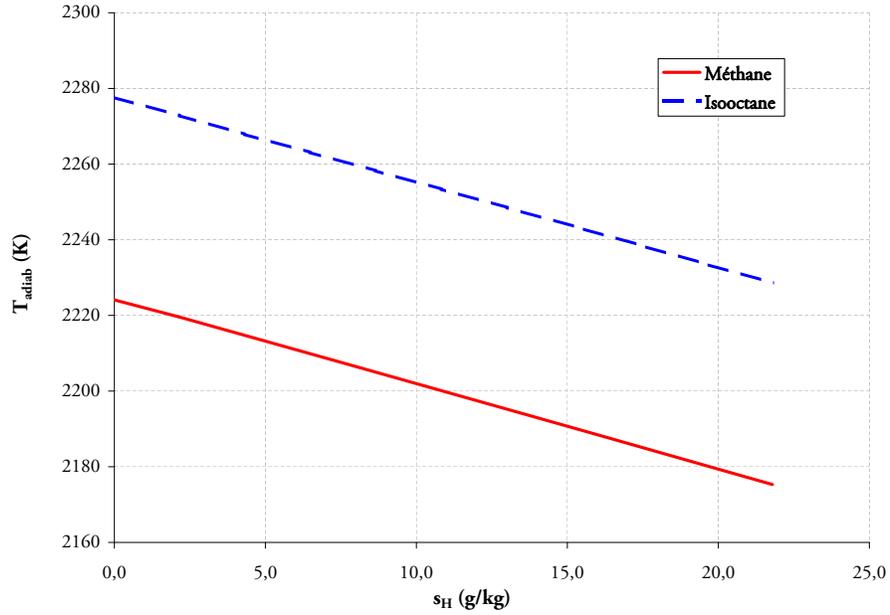


FIG. 2.8 – Effet de s_H sur la température adiabatique de fin de combustion à $T_{gf} = 300$ K et $\phi=1,0$.

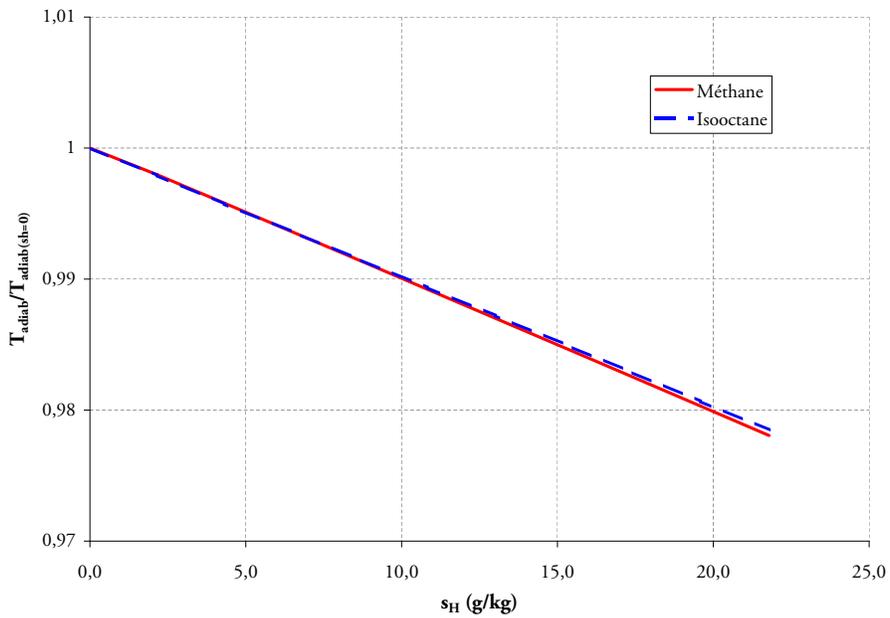


FIG. 2.9 – Effet de s_H sur la température adiabatique de fin de combustion adimensionnée par sa valeur à humidité nulle ($s_H = 0$ g.kg⁻¹) pour un point de fonctionnement à $T_{gf} = 300$ K et $\phi=1,0$.

2.3.3 Oxydes d'azote

a. Processus de formation des oxydes d'azote

Il existe trois différents processus de formation des oxydes d'azotes au cours d'une combustion [39] :

- le NO précoce (ou prompt NO), formé par la réaction de l'azote contenue dans l'air avec des radicaux hydrocarbonés tels que CH, CH₂ donnant des NH, HCN s'oxydant à leur tour en NO.
- le NO_X thermique, formé à partir de l'azote et l'oxygène contenu dans l'air. Le mécanisme de formation de ces oxydes d'azote est connu sous le nom de mécanisme de Zeldovich. Les réactions de ce mécanisme sont :



Le taux de formation du NO est donné par l'expression :

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = k_1[\text{N}_2][\text{O}_2]^{1/2}T^{-1/2}e^{-k_2/T} \quad (2.2)$$

avec T la température ; $[\text{NO}]$, $[\text{N}_2]$, $[\text{O}_2]$ les concentrations molaires et k_1 , k_2 des constantes ($k_1 = 6,06 \cdot 10^{13}$ et $k_2 = 69.070$). Cette expression démontre la grande dépendance du taux de formation du NO vis à vis d'une part de la température et d'autre part la concentration en oxygène. Par exemple une diminution de la température de 2250 à 2200 K fait baisser la production de NO d'un facteur 2.

- le NO_X combustible, formé à partir de l'azote contenu dans le combustible.

b. Résultats

La Fig. 2.10 représente les émissions d'oxydes d'azote d'une flamme laminaire de prémélange air/méthane et air/isooctane ayant comme température des gaz frais 300 K et une richesse de 1,0. On observe une diminution des émissions de NO_X par ajout d'eau dans les gaz frais. Cette diminution atteint 385 ppm pour le passage d'un air sec à un mélange totalement saturé en eau dans les gaz frais pour un mélange air/méthane et 475 ppm dans le cas air/isooctane. Cette diminution est en partie justifiée par la diminution de la température adiabatique de fin de combustion (section 2.3.2) qui a pour effet de diminuer le taux de production des NO thermiques.

La variation des émissions des oxydes d'azotes reste cependant la même dans le cas du méthane ou de l'isooctane comme le montre la Fig. 2.10. Cette similitude reste cohérente par rapport aux résultats obtenus sur T_{adiab} . En effet les NO_X sont principalement produits par le NO_X thermique dans notre cas (carburant mono composant sans azote, et mélange stœchiométrique) : la baisse de température observée pour les deux carburants étant la même (Fig. 2.9), les émissions d'oxydes d'azotes suivent alors les mêmes tendances.

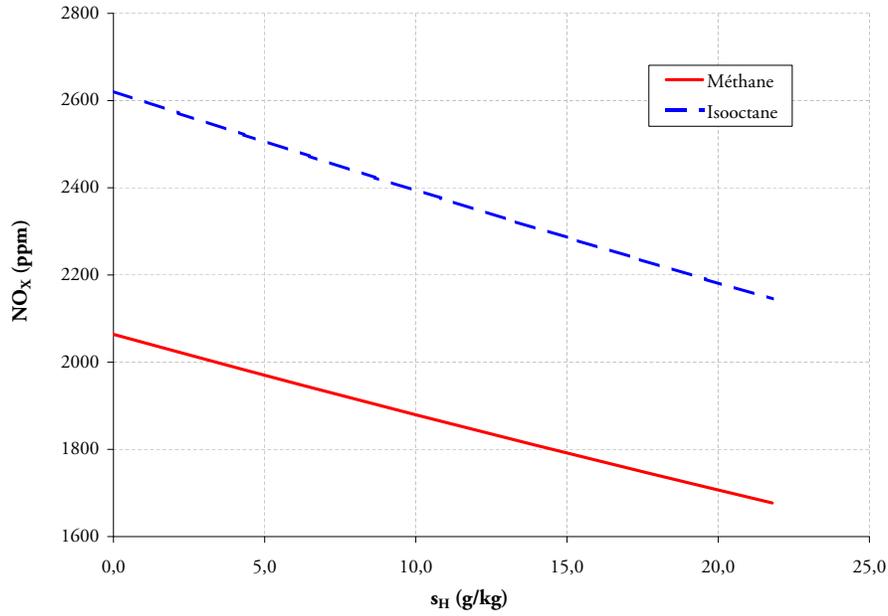


FIG. 2.10 – Effet de s_H sur les émissions de NO_x à $\phi = 1,0$ et $T_{gf} = 300$ K.

Les émissions d'oxydes d'azote sont atténuées lors d'un ajout d'eau dans les gaz frais pour le méthane et l'isooctane. Cet effet est justifié par la dilution du mélange, la capacité calorifique du mélange ainsi que la chimie.

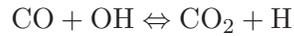
2.3.4 Monoxyde de carbone

a. Processus de formation du monoxyde de carbone

La formation du CO intervient comme l'une des principales étapes du processus d'oxydation des hydrocarbures [39] :



où R représente le radical hydrocarbure. Le CO formé est ensuite oxydé en CO₂ :



Les émissions de CO se produisent essentiellement pour des mélanges riches. A la stœchiométrie ces émissions sont faibles et sont presque nulles dans le cas d'un mélange pauvre.

b. Résultats

La Fig. 2.12 représente les émissions de monoxyde de carbone d'une flamme laminaire de prémélange ayant comme température des gaz frais 300 K et une richesse de 1,0. La concentration

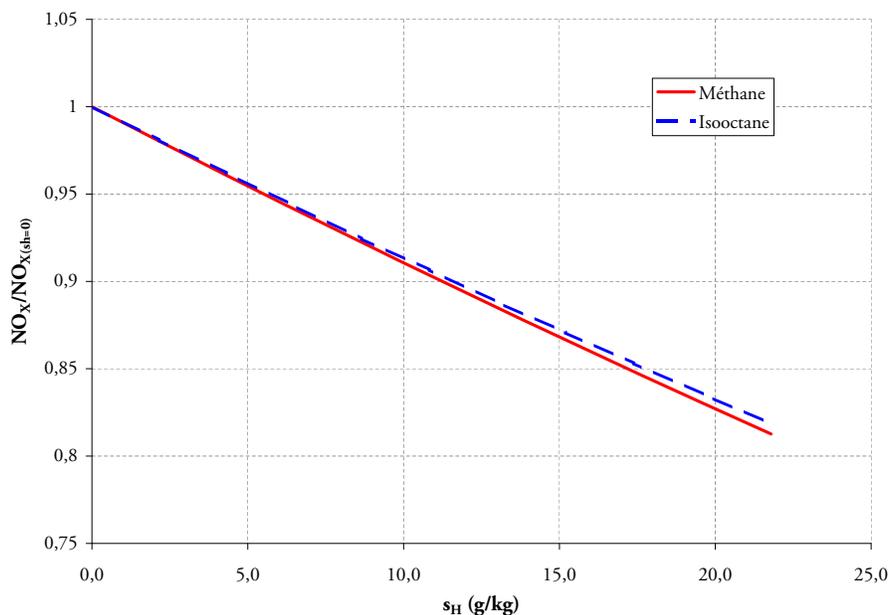


FIG. 2.11 – Effet de s_H sur les émissions de NO_x adimensionnées par sa valeur à humidité nulle ($s_H = 0 \text{ g.kg}^{-1}$) pour un point de fonctionnement à $\phi = 1,0$ et $T_{gf} = 300 \text{ K}$.

de CO dans les gaz brûlés est faible ($< 1,0\%$ dans le cas du méthane) dû au mélange stœchiométrique. Les émissions de CO baissent par ajout d'eau dans les gaz frais. Cette diminution est de $0,20\%$ pour un mélange allant de l'air sec à un air totalement saturé en eau à 300 K dans le cas du méthane et de $0,26\%$ dans le cas de l'isooctane.

L'adjonction de vapeur d'eau dans les gaz frais fait donc diminuer la production de monoxyde de carbone d'une flamme laminaire prémélangée, aussi bien pour du méthane que pour de l'isooctane.

2.3.5 Hydrocarbures imbrûlés - Cas du méthane

Les hydrocarbures imbrûlés (HC) dans une flamme de prémélange se forment majoritairement pour des mélanges riches, suite à l'excès de carburant dans le mélange. La concentration des HC dans le cas d'une flamme stœchiométrique ou pauvre est très faible et le reste avec l'addition de vapeur d'eau. Il est intéressant par contre, de regarder comment les HC varient avec l'addition d'eau pour des régimes riches. A $\phi = 1,5$, la Fig. 2.14 montre les HC dans les gaz brûlés en fonction de s_H . La production d'hydrocarbures imbrûlés est fortement influencée par la présence d'eau. Ajouter de la vapeur d'eau dans les gaz frais fait monter la concentration de HC dans les gaz brûlés. Ceci est vrai à $\phi = 1,5$ ou $1,2$ (Fig. 2.14) et suggère que l'ajout d'eau dans un moteur à injection directe par exemple, pourrait mener à une augmentation des HC si la combustion se produit localement dans des zones riches.

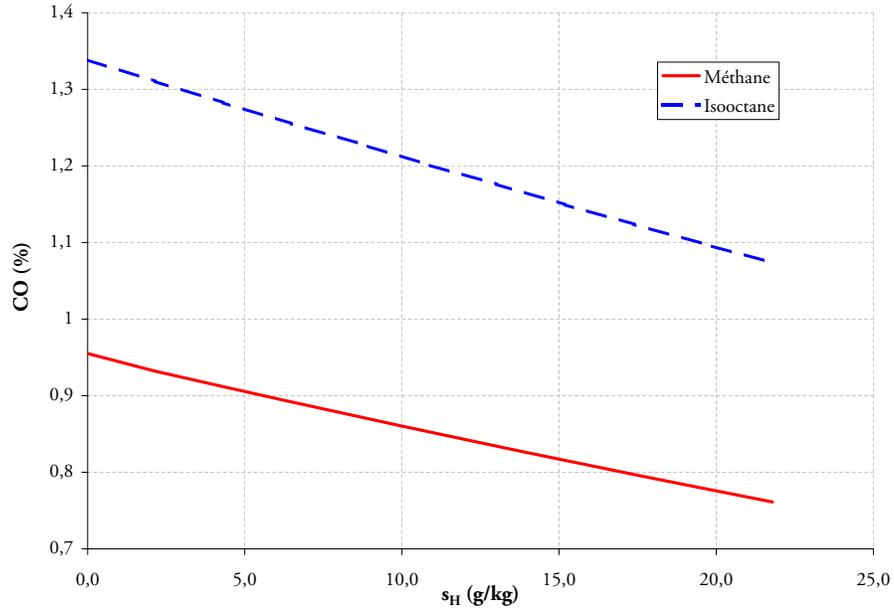


FIG. 2.12 – Effet de s_H sur les émissions de CO à $\phi = 1,0$ et $T_{gf} = 300$ K.

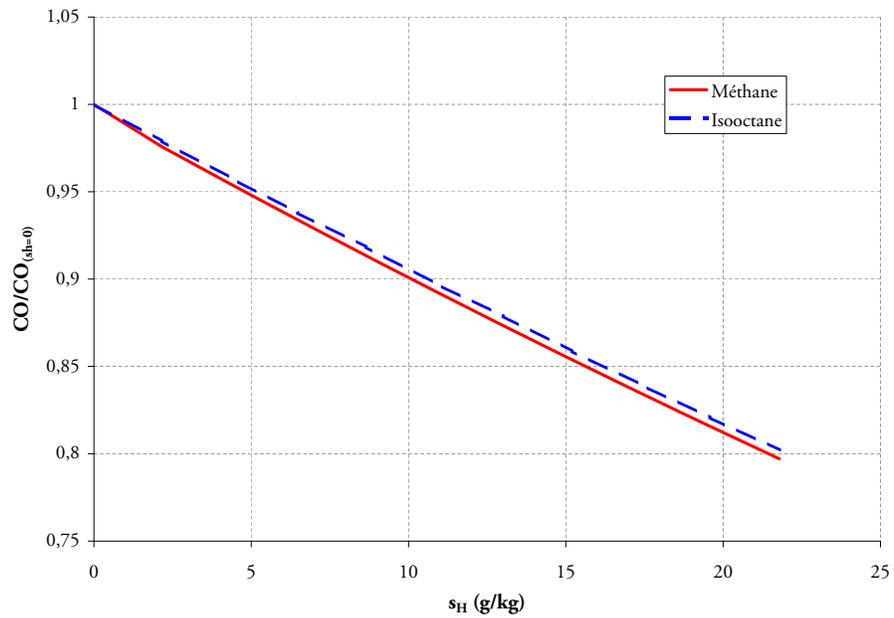


FIG. 2.13 – Effet de s_H sur les émissions de CO adimensionnées par sa valeur à humidité nulle ($s_H = 0$ g.kg⁻¹) pour un point de fonctionnement à $\phi = 1,0$ et $T_{gf} = 300$ K.

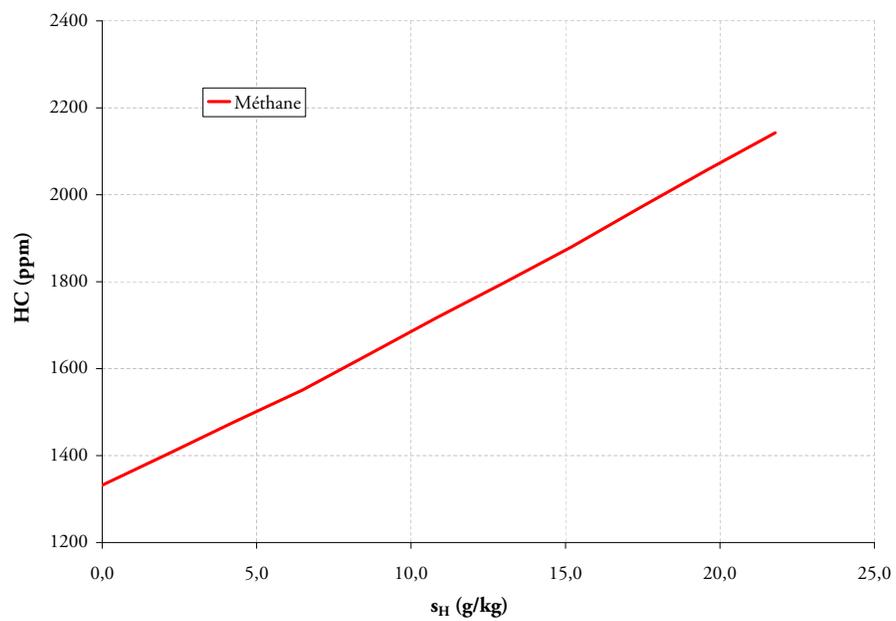


FIG. 2.14 – Effet de s_H sur les émissions de HC à $\phi = 1,5$ et $T_{gf} = 300$ K. Fraction massique de HC dans les gaz brûlés. Cas du méthane seul.

2.4 Etude numérique de l'effet de H₂O à 1 bar et à température des gaz frais variable

Les effets de l'ajout d'eau dans les gaz frais ont été exposés dans la section précédente dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée pour une seule température de gaz frais, à savoir 300 K. Cette température est un cas de référence car il équivaut aux conditions ambiantes de température et de pression (CNTP) à savoir une température de 25°C (298,15 K) et une pression de 10⁵ Pa (1 bar). Un des objectifs de cette étude est de déterminer les effets de l'humidité sur un moteur à piston, qui peut fonctionner dans une large gamme de conditions atmosphériques (température, pression, humidité ...). Pour mener à bien cette étude il est donc nécessaire d'étudier ces effets de l'humidité pour d'autres températures des gaz frais. Les températures choisies couvrent une grande plage de température, de 230 K à 400 K.

Monter la température des gaz frais à un double intérêt d'étude. Le premier est bien sûr de valider le schéma cinétique de combustion pour un autre cas (330 K cf.2.2). Le second intérêt est de pouvoir augmenter la quantité d'eau contenue dans les gaz frais suite à l'augmentation de la pression de vapeur saturante. Le tableau 2.1 résume les gammes d'humidité spécifique pour les cas choisis. Expérimentalement, deux cas ont été utilisés : 300 et 330 K. Le cas 330 K (57°C) a l'intérêt de correspondre au maximum raisonnable pour un moteur consommant de l'air dans un pays très chaud. Les températures plus élevées (370 et 400 K) correspondent à des cas avec EGR et ne sont étudiés que numériquement.

Température des gaz frais (K)	Numérique	Expérimental	Humidité spécifique maximale s_H (g.kg ⁻¹)	Humidité relative maximale H_r (%)
230	✓		0,078	100
270	✓		2,93	100
300	✓	✓	21,8	100
330	✓	✓	112,1	100
370	✓		limitée à 250	38,5
400	✓		limitée à 250	...

TAB. 2.1 – Récapitulatif des différents cas expérimentaux et numériques pour les différentes températures des gaz frais

2.4.1 Vitesse de flamme laminaire

La Fig. 2.15 représente les résultats obtenus expérimentalement (symboles "Δ" et "◇") et numériquement (lignes) pour un mélange stœchiométrique pour des températures des gaz frais allant de 230 K à 400 K. L'effet observé sur la vitesse de flamme laminaire dans le cas de la température des gaz frais de 300 K (Fig. 2.3) est conservé pour les autres températures des gaz

frais, il est même intensifié au fur et à mesure que la température augmente. Plus la température des gaz frais augmente, plus la décroissance de S_L devient importante (pour une même humidité). Par exemple une augmentation de s_H de 0 à 20 g.kg⁻¹ provoque une diminution de la vitesse de flamme de 0,045 et 0,070 m.s⁻¹ pour des températures de gaz frais respectivement de 300 et 400 K soit 12% de variation relative ($\Delta S_L/S_L$). La sensibilité de S_L par rapport à s_H ne dépend que très peu de la température des gaz frais.

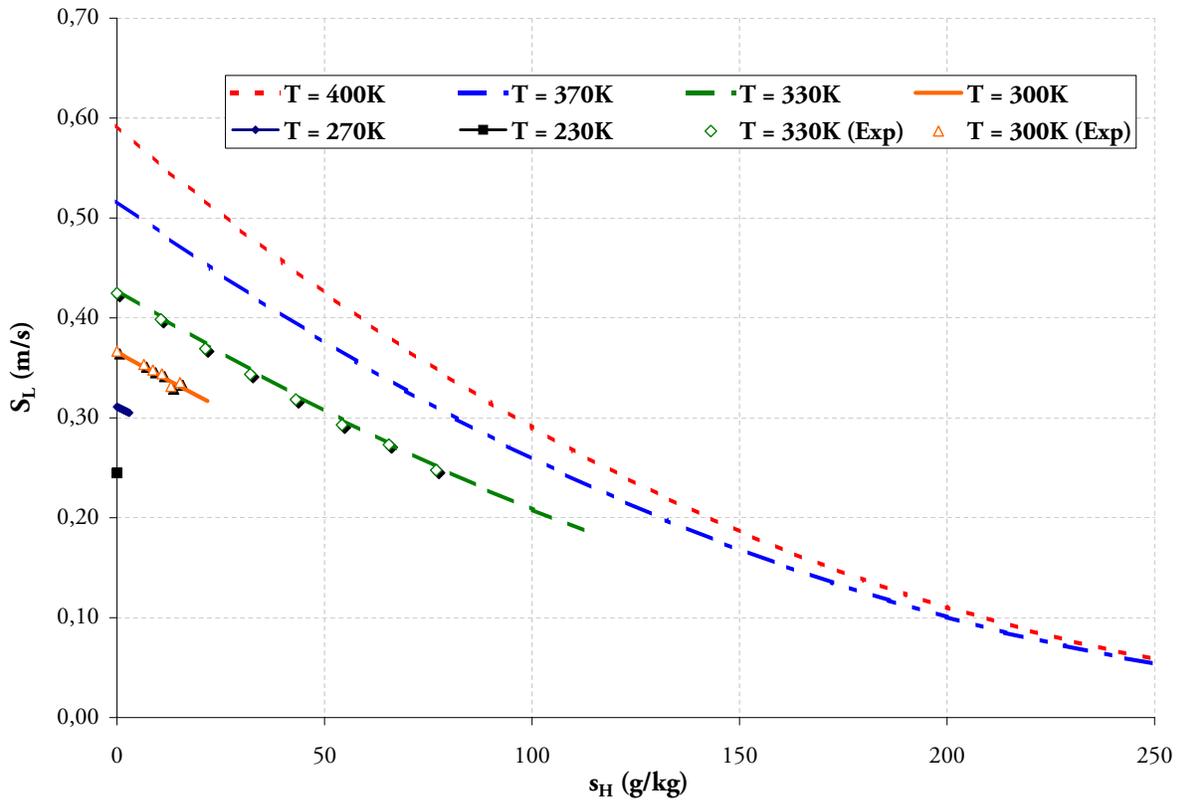


FIG. 2.15 – Effet de s_H sur la vitesse de flamme laminaire à $\phi = 1,0$ pour différentes températures des gaz frais ($230\text{ K} < T_{gf} < 400\text{ K}$) pour un mélange air/méthane. Tous les résultats sont numériques sauf les symboles qui correspondent aux mesures faites sur le bec Bunsen de l'IMFT

Les mêmes tendances sont observées dans le cas de l'isooctane sur la Fig. 2.16.

2.4.2 Température adiabatique de fin de combustion

La Fig. 2.17 représente les températures adiabatiques de fin de combustion d'une flamme stoechiométrique pour différentes températures des gaz frais pour un mélange air/méthane. Il est à remarquer sur cette figure que la variation de la température adiabatique par rapport à l'humidité spécifique est constante quelle que soit la température des gaz frais et l'humidité à

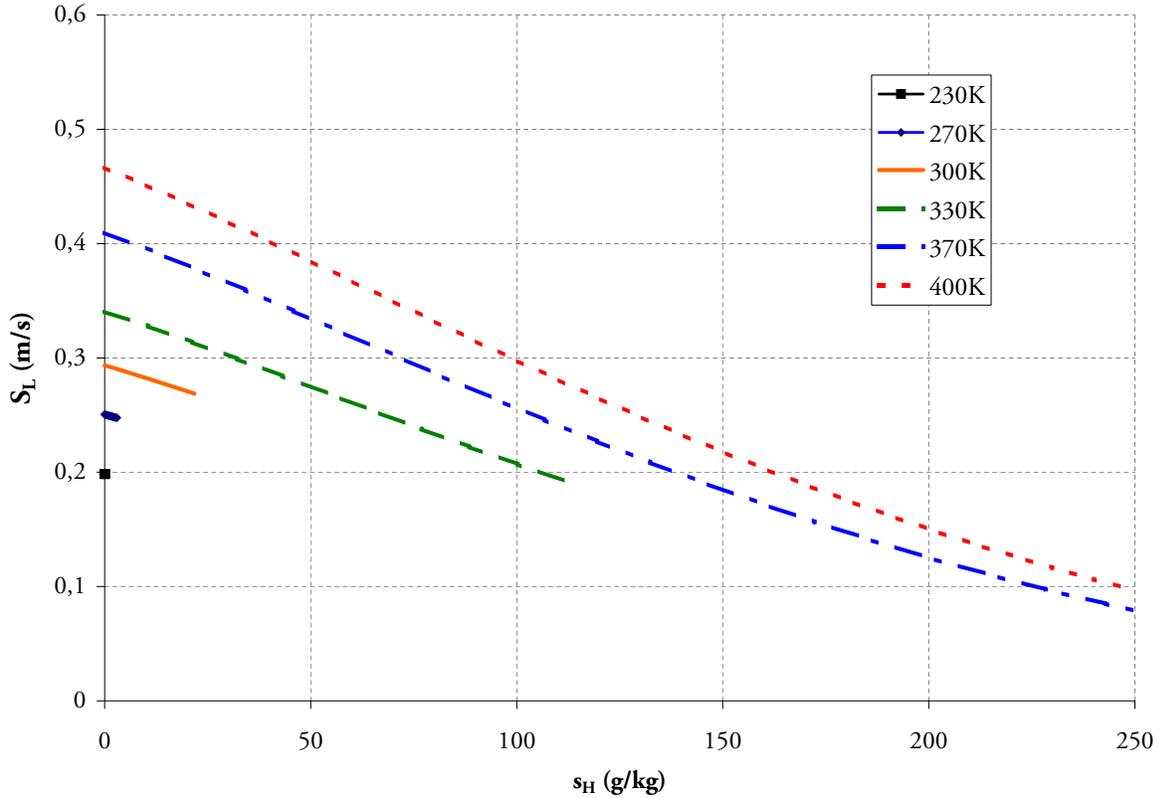


FIG. 2.16 – Effet de s_H sur la vitesse de flamme laminaire à $\phi = 1,0$ pour différentes valeurs de la température des gaz frais ($230 \text{ K} < T_{gf} < 400 \text{ K}$) pour un mélange air/isooctane.

laquelle on se place. La température adiabatique de fin de combustion évolue de manière linéaire en fonction de l'humidité spécifique du mélange. Il est possible d'interpoler une équation générale à partir de ces résultats pour exprimer la température adiabatique de fin de combustion (T_{adiab}) en fonction de l'humidité spécifique (s_H) :

$$T_{\text{adiab}} = -2,248 \times s_H + T_{\text{adiab}}|_{s_H=0} \quad (2.3)$$

avec $T_{\text{adiab}}|_{s_H=0}$ la température adiabatique de fin de combustion pour un mélange stœchiométrique composé d'air sec. La variation de T_{adiab} suite à une variation de s_H de 0 à 20 g.kg⁻¹ est de 45 K dans les cas 300 et 400 K. La température des gaz frais n'a donc que très peu d'effet sur la sensibilité de T_{adiab} par rapport à s_H .

La Fig. 2.18 présente la température adiabatique de fin de combustion T_{adiab} d'une flamme stœchiométrique air/isooctane pour différentes températures des gaz frais. Le comportement de T_{adiab} d'un mélange air/isooctane reste le même que pour un mélange air/méthane. La température des gaz frais a très peu d'effet sur la sensibilité de T_{adiab} par rapport à s_H . Par contre, dans

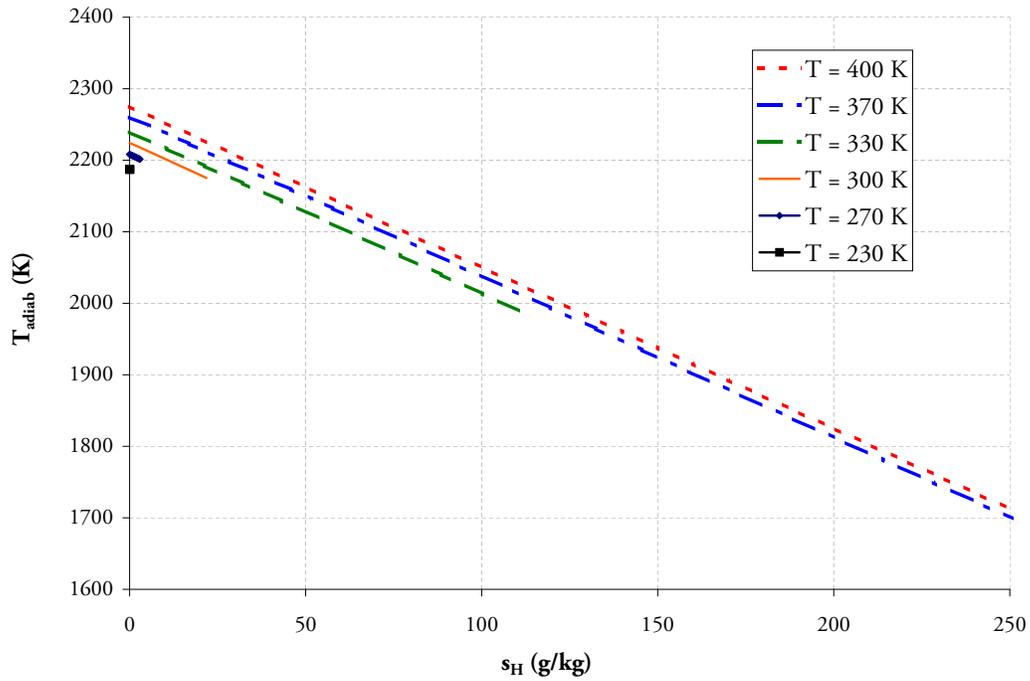


FIG. 2.17 – Effet de s_H sur la température adiabatique de fin de combustion à $\phi = 1,0$ pour différentes températures des gaz frais pour un mélange air/méthane.

tous les cas, ajouter de la vapeur d'eau fait baisser considérablement la température adiabatique de fin de combustion (plusieurs centaines de Kelvin à $s_H = 200$ g.kg⁻¹).

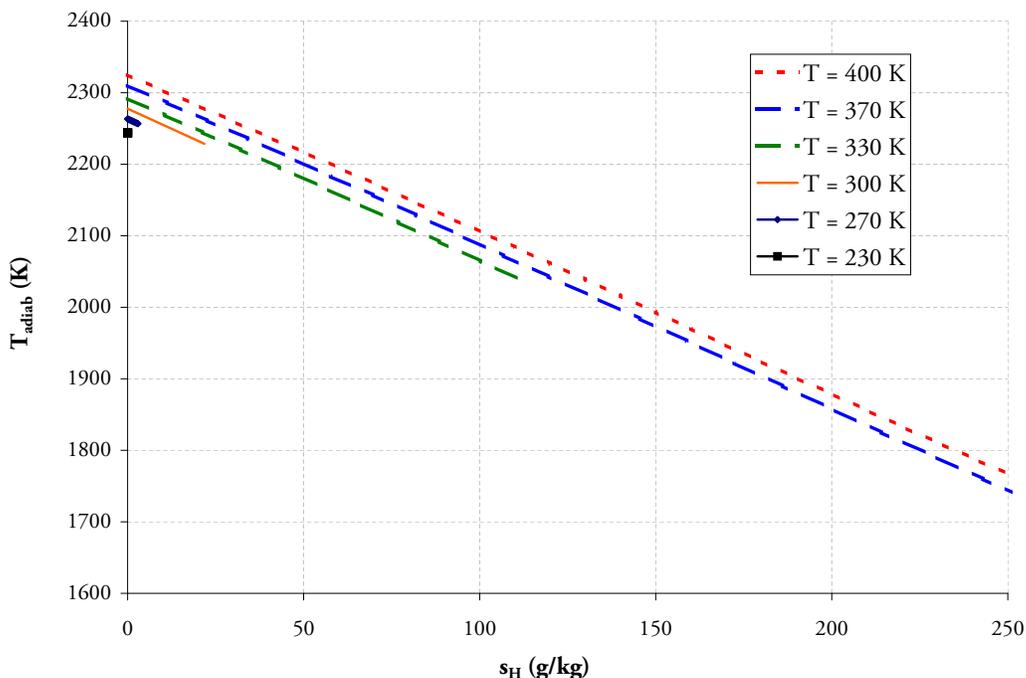


FIG. 2.18 – Effet de s_H sur la température adiabatique de fin de combustion à $\phi = 1,0$ pour différentes valeurs de la température des gaz frais pour un mélange air/isooctane.

2.4.3 Produits de combustion

2.4.3.1 Oxydes d'azote

La Fig. 2.19 donne les émissions d'oxydes d'azote d'une flamme stœchiométrique air/méthane pour différentes valeurs de températures des gaz frais. La diminution des émissions de NO_x suite à une variation de s_H de 0 à 20 g.kg⁻¹ est de l'ordre de 17%. Dans le cas de l'isooctane (Fig. 2.20), cette même variation de s_H provoque une diminution de NO_x de 17% elle aussi. La température des gaz frais a donc un effet sur la sensibilité des émissions de NO_x par rapport à s_H et cette sensibilité diminue quand la température des gaz frais monte.

2.4.3.2 Monoxyde de carbone

Les émissions de monoxyde de carbone d'une flamme stœchiométrique sont tracées pour différentes valeurs de la température des gaz frais sur la Fig. 2.21 pour un mélange air/méthane et sur la Fig. 2.22 pour un mélange air/isooctane. La variation relative de CO suite à une augmentation de 0 à 20 g.kg⁻¹ de s_H est de 18% dans le cas du méthane. Le comportement des émissions de CO dans le cas de l'isooctane reste très similaire au comportement de ces émissions

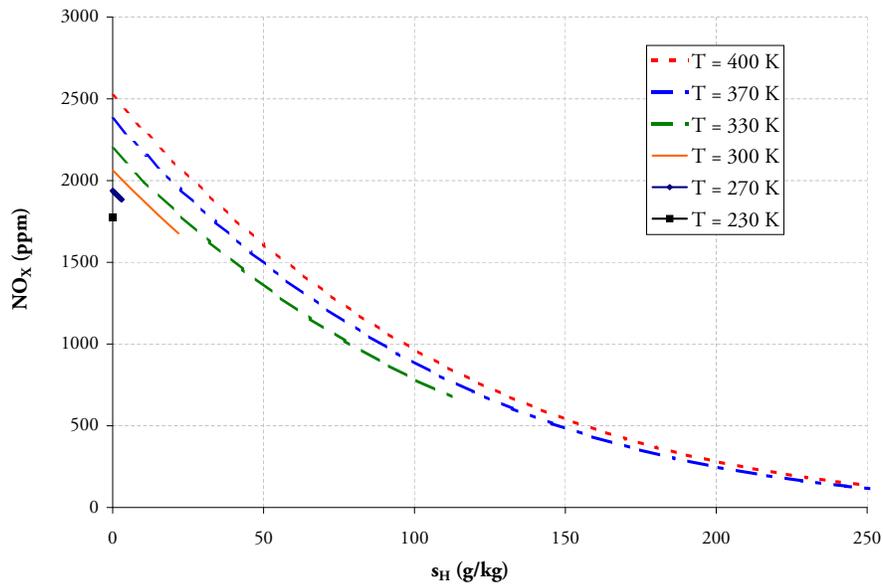


FIG. 2.19 – Effet de s_H sur les émissions d'oxydes d'azotes à $\phi = 1,0$ pour différentes valeurs de la températures des gaz frais pour une flamme air/méthane.

dans le cas du méthane, une variation de s_H de 0 à 20 g.kg⁻¹ entraîne une diminution du CO de aussi 18%. L'augmentation de la température des gaz frais n'a que très peu d'effet sur la sensibilité des émissions de CO vis à vis de l'humidité spécifique.

2.4.3.3 Hydrocarbures imbrûlés

La Fig. 2.23 représente les émissions d'hydrocarbures imbrûlés d'une flamme riche ($\phi = 1,5$) pour différentes valeurs de température des gaz frais. La production des hydrocarbures imbrûlés, à humidité nulle, est très sensible à la température des gaz frais et une augmentation de la température de 300 à 330 K fait diminuer les HC de près de 27%. La présence d'eau dans les gaz frais fait augmenter la production des HC. Pour toutes les températures testées ici pour les gaz frais, l'ajout de vapeur d'eau entraîne une augmentation forte des imbrûlés HC dans les gaz brûlés.

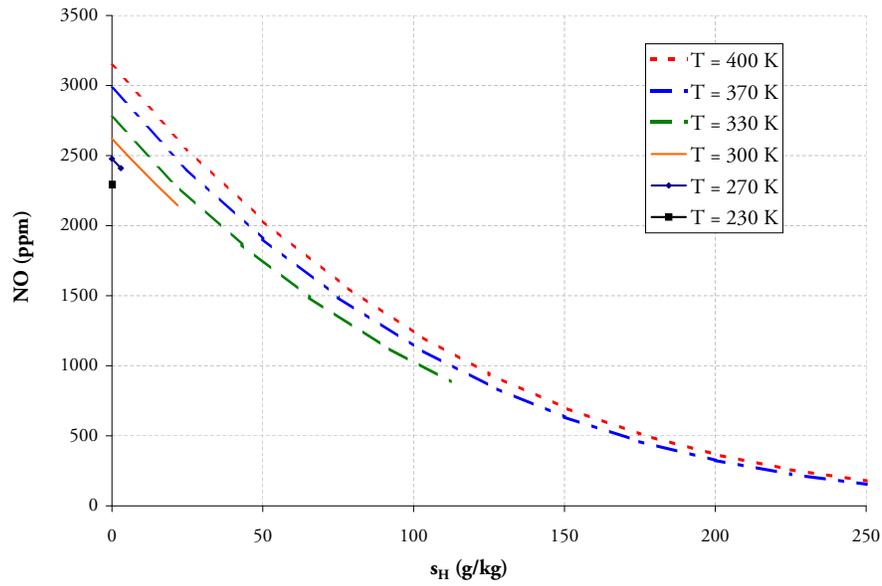


FIG. 2.20 – Effet de s_H sur les émissions d'oxydes d'azote à $\phi = 1,0$ pour différentes valeurs de la température des gaz frais pour une flamme air/isooctane.

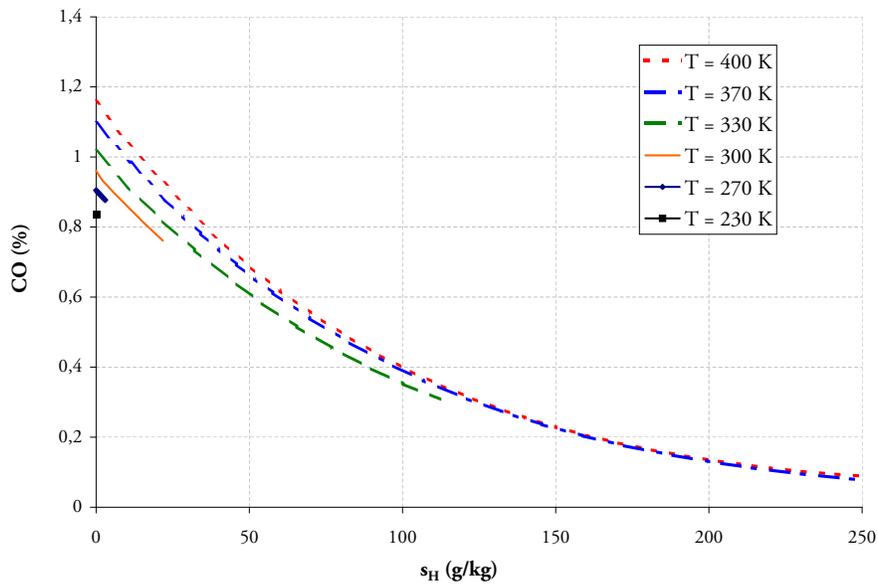


FIG. 2.21 – Effet de s_H sur les émissions de monoxyde de carbone à $\phi = 1,0$ pour différentes températures des gaz frais (air/méthane).

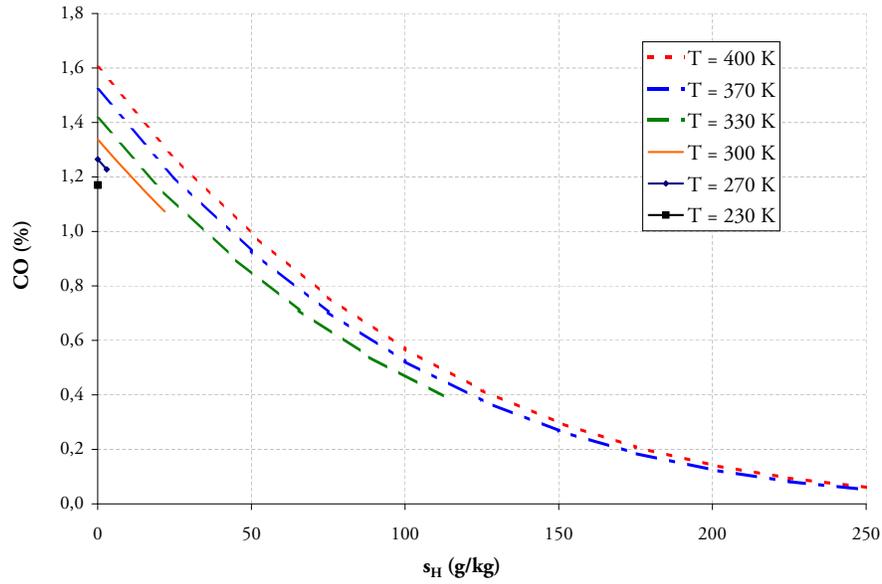


FIG. 2.22 – Effet de s_H sur les émissions de monoxyde de carbone à $\phi = 1,0$ pour différentes valeurs de la température des gaz frais (air/isooctane).

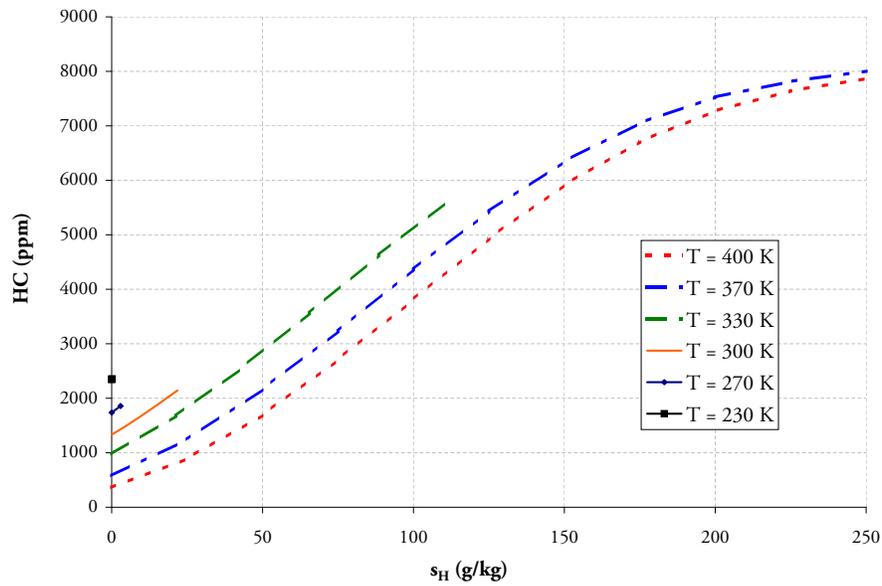


FIG. 2.23 – Effet de s_H sur les émissions d'hydrocarbures imbrûlés à $\phi = 1,5$ pour différentes températures des gaz frais (air/méthane).

2.5 Etude numérique de l'effet de H₂O lors d'une compression isentropique

2.5.1 Modélisation de la compression

Les effets de l'humidité sur une flamme laminaire prémélangée viennent d'être exposés dans le cas d'une flamme à pression atmosphérique correspondant à la configuration expérimentale du brûleur bec Bunsen. Un des objectifs de cette étude est de déterminer les effets de l'humidité sur un moteur à piston où la combustion s'opère à des pressions bien supérieures à la pression d'admission du moteur : il est donc nécessaire d'étudier les effets de l'ajout d'eau dans les gaz frais lors d'une compression de ceux-ci. Un moteur à allumage commandé fonctionne suivant le cycle théorique de Beau de Rochas (section 3.1) où l'état thermodynamique des gaz frais avant la combustion est précédé d'une compression isentropique. En supposant donc la compression isentropique, la température T_2 en fin de compression peut s'exprimer par la relation suivante :

$$T_2 = T_1 \left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$$

où T_1 est la température avant compression, P_2/P_1 le taux de compression et $\gamma = 1,4$.

On se limitera ici à des cas sans EGR où seule la vapeur d'eau présente dans l'air ambiant entre ensuite dans le moteur. Deux températures des gaz frais (avant compression) ont été étudiées : $T_1 = 300$ et 330 K, mais seul le cas de la température des gaz frais de 330 K va être exposé ici. Les conclusions qui sont décrites ici sur le cas à 330 K restent aussi valables dans le cas à 300 K. La température de 300 K est choisie car elle représente au mieux les conditions d'utilisation standards d'un moteur. La température de 330 K est elle choisie pour étudier des conditions de fonctionnement moteurs plus vastes (climats tropicaux, EGR, . . .). Dans chaque cas on étudiera les modifications engendrées par le passage d'un air sec à un air saturé en vapeur d'eau. La gamme de pression étudiée dans cette étude est de 1 à 50 bar, représentant la gamme de pression de fonctionnement d'un moteur à allumage commandé. Les températures des gaz frais après compression sont données dans le tableau 2.2.

P_2 (bar)	$T_2 = 330K$
1	330,0
2	402,3
5	522,7
10	637,1
20	776,7
30	872,1
40	946,8
50	1009,1

TAB. 2.2 – Températures des gaz frais après une compression isentropique à partir de $P_1 = 1$ bar, $\gamma = 1,4$ et $T_1 = 300$ ou 330 K.

2.5.2 Vitesse de flamme laminaire

La Fig. 2.24 représente l'évolution de la vitesse de flamme laminaire prémélangée en fonction de la pression pour un air sec ($s_H = 0$ g.kg⁻¹) et un air à 330 K saturé en vapeur d'eau ($s_H = 112,1$ g.kg⁻¹) pour un mélange air/méthane. La variation de S_L du cas air sec au cas saturé en vapeur d'eau est de 0,217 m.s⁻¹ pour $P_2 = 1$ bar, cette variation atteint 0,554 m.s⁻¹ pour une pression de 50 bar. Dans le cas de l'isooctane (Fig. 2.25) cette même variation de s_H entraîne une variation de S_L de 0,149 m.s⁻¹ et 0,562 m.s⁻¹ pour un taux de compression de respectivement 1 et 50. Les effets de s_H sur S_L restent donc forts même quand la pression augmente.

2.5.3 Température adiabatique de fin de combustion

L'évolution de la température adiabatique de fin de combustion en fonction de la pression pour un air sec ($s_H = 0$ g.kg⁻¹) et un air saturé en vapeur d'eau ($s_H = 112,1$ g.kg⁻¹) est tracée Fig. 2.26 pour un mélange air/méthane et sur la Fig. 2.27 pour un mélange air/isooctane. Les écarts de T_{adiab} entre les cas air sec / air saturé en vapeur d'eau diminuent légèrement avec la pression. Comme attendu, l'ajout d'eau fait baisser la température maximum de flamme et cela à toutes les pressions. Ceci a un impact direct sur les NO_x comme le montre la section suivante.

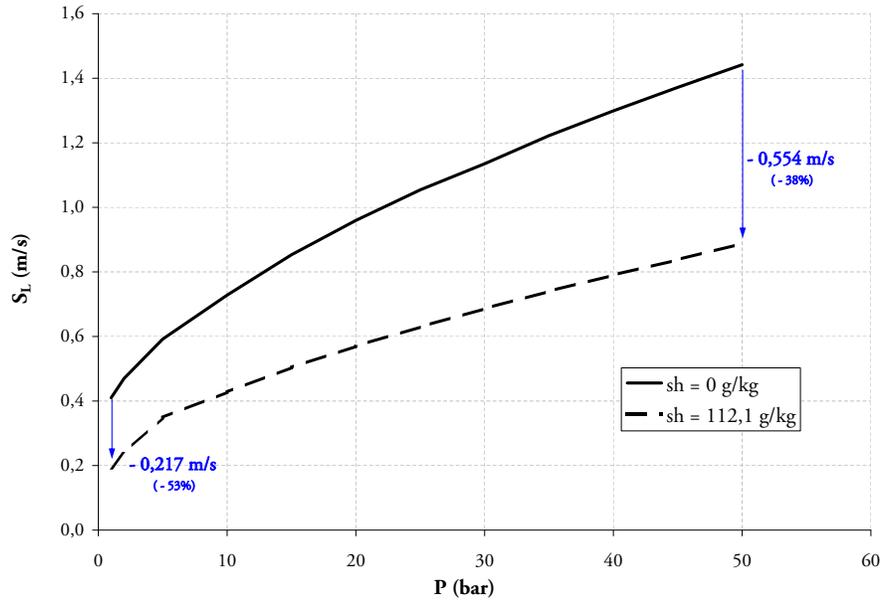


FIG. 2.24 – Effet d’une compression isentropique sur la vitesse de flamme laminaire pour un mélange stoechiométrique air/méthane à une température initiale T_1 de 330 K.

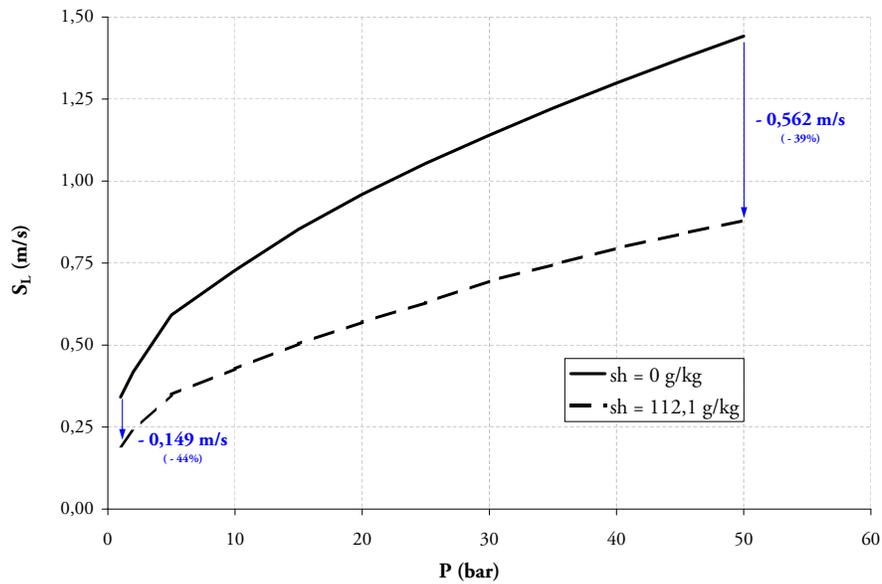


FIG. 2.25 – Effet d’une compression isentropique sur la vitesse de flamme laminaire à $\phi = 1,0$ pour un mélange stoechiométrique air/isooctane à une température initiale de 330 K.

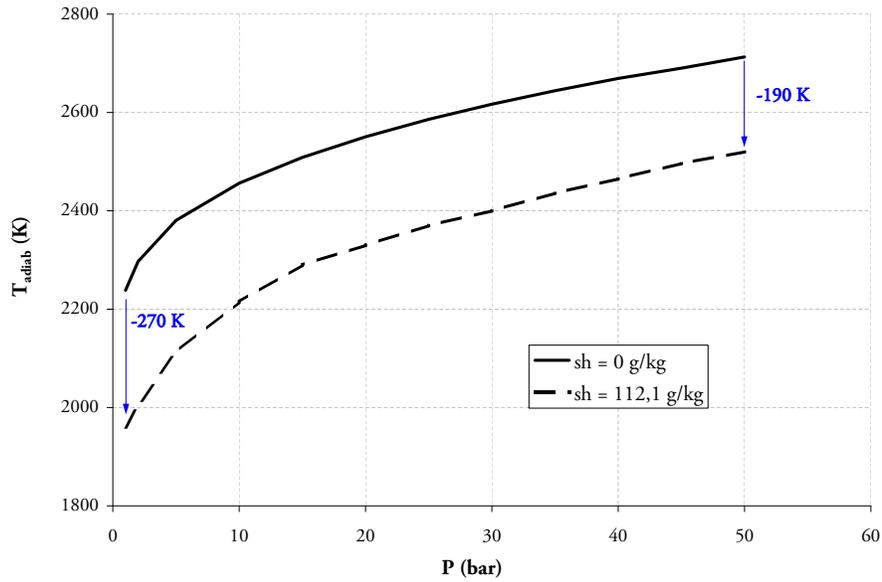


FIG. 2.26 – Effet d'une compression isentropique sur la température adiabatique de fin de combustion pour un mélange stœchiométrique air/méthane à une température initiale T_1 de 330 K.

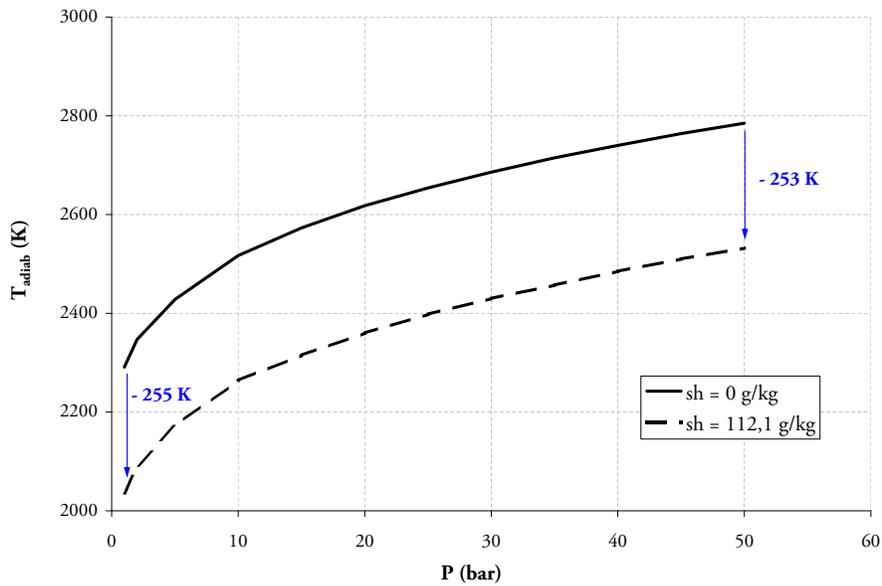


FIG. 2.27 – Effet d'une compression isentropique sur la température adiabatique de fin de combustion à $\phi = 1,0$ pour un mélange stœchiométrique air/isooctane à une température initiale de 330 K.

2.5.4 Produits de la combustion

2.5.4.1 Oxydes d'azotes

La Fig. 2.28 représente l'évolution des émissions d'oxydes d'azote en fonction de la pression pour un air sec ($s_H = 0 \text{ g.kg}^{-1}$) et un air saturé en vapeur d'eau ($s_H = 112,1 \text{ g.kg}^{-1}$). La diminution des NO_X quand on passe du cas air sec au cas saturé en vapeur d'eau, est importante à toutes les pressions : là aussi, l'ajout d'eau change considérablement les émissions de NO_X et cet effet, observé à 1 bar est observé à toutes les valeurs de pression rencontrées dans un moteur à piston. Les mêmes conclusions sont observées dans le cas de l'isooctane (Fig. 2.29).

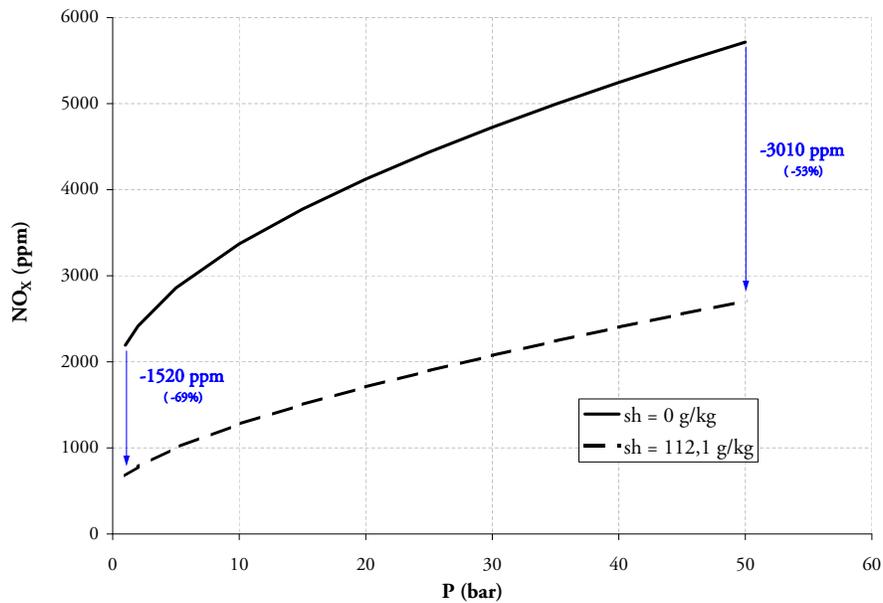


FIG. 2.28 – Effet d'une compression isentropique sur les émissions d'oxydes d'azote pour un mélange stœchiométrique air/méthane à une température initiale T_1 de 330 K

2.5.4.2 Monoxyde de carbone

L'évolution des émissions de monoxyde de carbone en fonction de la pression pour un air sec ($s_H = 0 \text{ g.kg}^{-1}$) et un air saturé en vapeur d'eau ($s_H = 112,1 \text{ g.kg}^{-1}$) est tracée sur la Fig. 2.30. Encore un fois, l'effet de l'ajout d'eau observé à 1 bar se conserve à toutes les pressions : l'eau fait baisser le niveau de CO et ce dans des proportions considérables. La diminution de CO est de 0,76% sans compression et de 0,89% pour une compression de 50 bar. La compression des gaz frais a pour effet de diminuer la sensibilité de CO par rapport à s_H . La Fig. 2.31 représente les émissions de CO pour une flamme stœchiométrique air/isooctane en fonction de la pression. Les

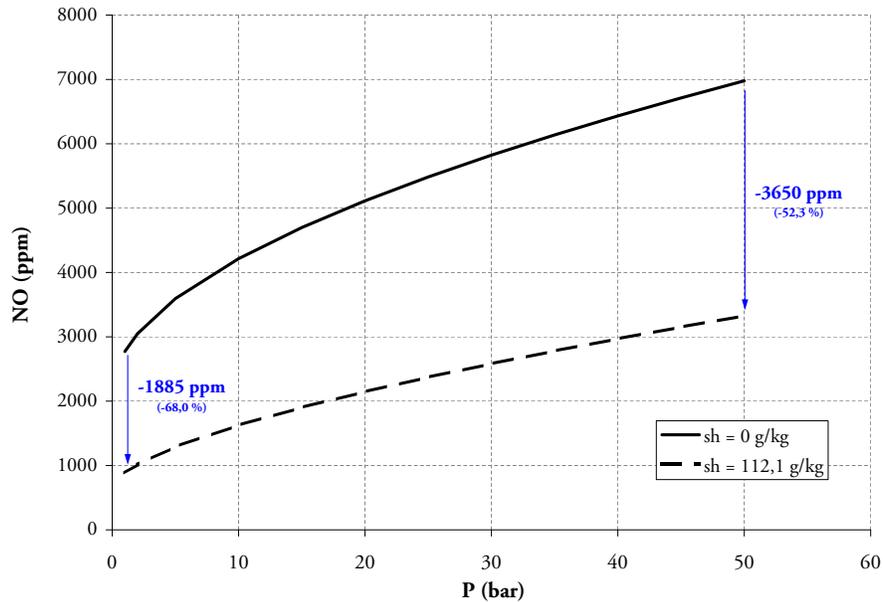


FIG. 2.29 – Effet d'une compression isentropique sur les émissions d'oxydes d'azote pour un mélange stœchiométrique air/isoctane à une température initiale de 330 K.

tendances observées dans le cas de l'isoctane restent les mêmes que ceux observées dans le cas du méthane.

2.5.4.3 Hydrocarbures imbrûlés

La Fig. 2.32 présente l'évolution des émissions d'hydrocarbures imbrûlés en fonction de la pression pour un air sec ($s_H = 0 \text{ g.kg}^{-1}$) et un air saturé en vapeur d'eau ($s_H = 21,8 \text{ g.kg}^{-1}$) pour un mélange riche $\phi = 1,5$. La compression isentropique du mélange a pour effet de diminuer la production d'hydrocarbures imbrûlés, pour la rendre très faible pour des valeurs de compressions supérieures à 10. Quand cet air est humide, le niveau de HC monte considérablement pour les pressions basses. A haute pression, aucune différence n'est constatée ($P_2 > 10 \text{ bar}$).

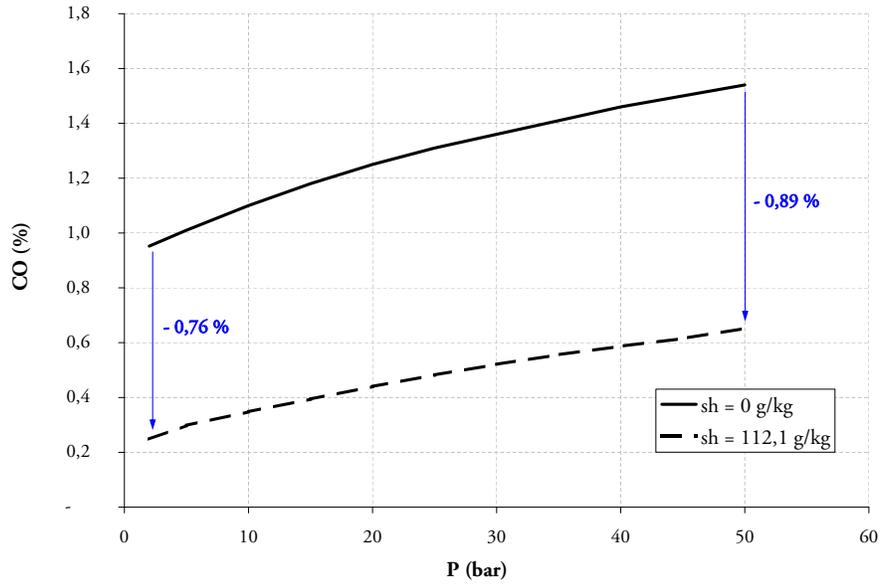


FIG. 2.30 – Effet d’une compression isentropique sur les émissions de monoxyde de carbone pour un mélange stœchiométrique à une température initiale T_1 de 330 K (air/méthane).

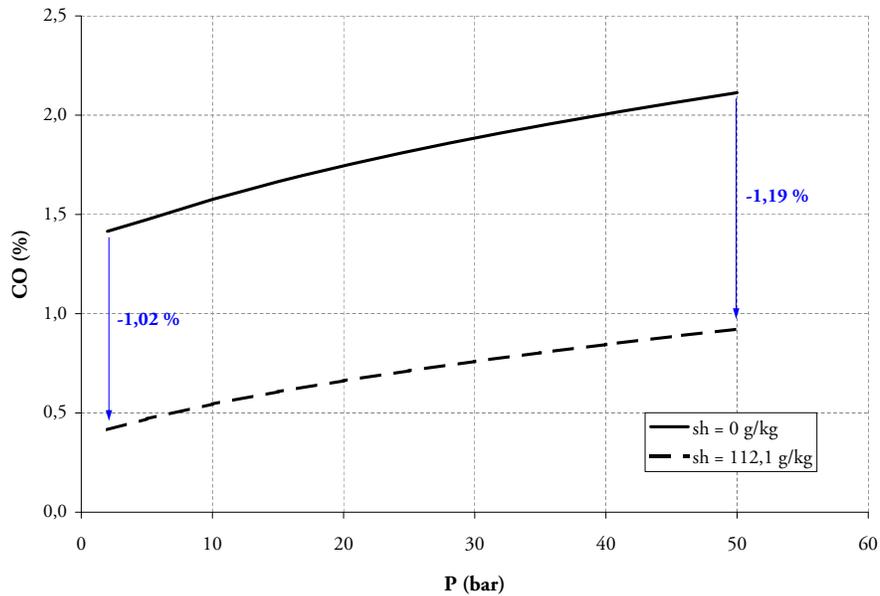


FIG. 2.31 – Effet d’une compression isentropique sur les émissions de monoxyde de carbone à $\phi = 1,0$ pour un mélange stœchiométrique à une température initiale de 330 K (air/isooctane).

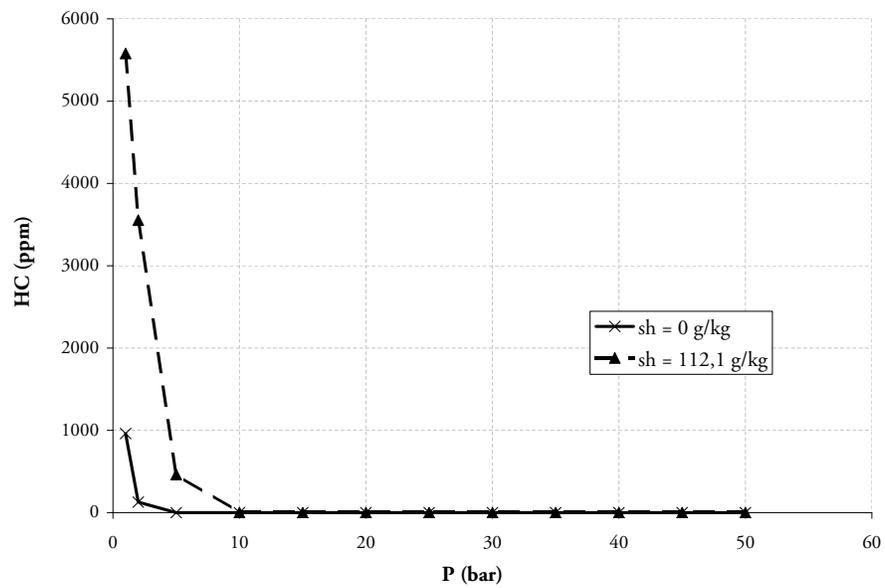


FIG. 2.32 – Effet d'une compression isentropique sur les émissions d'hydrocarbures imbrûlés pour un mélange riche ($\phi = 1,5$) à une température initiale T_1 de 330 K (air/méthane).

2.6 Conclusion sur les flammes laminaires prémélangées

La flamme laminaire prémélangée est le prototype de base des flammes rencontrées en combustion prémélangée dans les turbomachines ou dans les moteurs à piston. Toute modification de cette flamme entraîne des modifications sur le fonctionnement des moteurs. Les paramètres modifiant cette flamme sont la richesse du mélange, la température et la pression des gaz frais et leurs effets sur cette flamme sont connus. Les résultats présentés dans ce chapitre permettent de rajouter un paramètre pouvant modifier une flamme de prémélange, à savoir l'humidité de l'air dans les gaz frais. Le premier effet de la présence d'eau dans les gaz frais est de modifier la vitesse de propagation de la flamme (S_L) : la présence d'eau dans les gaz frais provoque une diminution de cette vitesse. Cette diminution peut dépasser 55% lors du passage d'un air sec à un air saturé en eau avec une température des gaz frais de 330 K. La température adiabatique de fin de combustion T_{adiab} est aussi modifiée par la présence d'eau dans les gaz frais. T_{adiab} baisse quand la concentration d'eau dans les gaz frais augmente, la sensibilité de cette variation est indépendante de la température des gaz frais mais diminue lors d'une compression isentropique.

La composition des gaz brûlés est aussi modifiée par s_H . Les émissions de NO_x et de CO sont diminuées par une augmentation de l'humidité des gaz frais. Cette diminution peut aller jusqu'à 70% lors du passage d'un air sec à un air saturé en eau pour une température des gaz frais de 330 K. Les émissions de HC sont, contrairement aux autres produits de combustion exposés ici, augmentées lors d'une augmentation de la concentration d'eau dans les gaz frais. Cette effet est accentué lors d'une augmentation de la température des gaz frais.

Tous ces effets observés dans le cadre des flammes laminaires prémélangées doivent altérer le fonctionnement d'un moteur à combustion interne, tant sur le plan des performances moteurs que sur le plan des émissions polluantes. L'objet du prochain chapitre est de corrélérer les résultats obtenus sur la flamme laminaire à ceux donnés par un moteur au banc d'essai. Bien sûr, sur ce banc, la carburant ne sera pas du méthane ou de l'isooctane pur mais on s'attend cependant à trouver des effets analogues avec un carburant réel.

Chapitre 3

Les effets de H_2O sur le fonctionnement d'un moteur à piston

En introduction, nous indiquions que cette thèse avait pour cadre la combustion dans les moteurs à piston. Le chapitre précédent a montré, dans le cadre académique d'une simple flamme laminaire prémélangée, que l'ajout d'eau avait pour conséquence d'une part une forte diminution des vitesses de flamme et d'autre part une diminution notable des émissions d'oxyde d'azote. Concernant la diminution des vitesses de flamme, cela devrait se traduire au niveau d'un moteur, par une diminution des vitesses de combustion ce qui devrait dégrader ses performances. Par ailleurs, la diminution des NO_x , favorable d'un point de vue environnemental, peut être interprétée comme étant le résultat de l'abaissement des températures de combustion lié à la présence d'eau. Si tel est le cas, cette diminution de température doit être couplée à une diminution de la pression dans le moteur pouvant d'une autre manière expliquer une éventuelle diminution des performances moteur.

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de l'effet de l'humidité de l'air admis sur les performances et les émissions polluantes d'un moteur à piston. Le moteur utilisé est un moteur quatre cylindres à allumage commandé de série, de moyenne cylindrée (1,6 litre) fonctionnant à l'essence.

Certes, le moteur est un système complexe qui n'apportera que des réponses partielles ne concernant que les entrées et les sorties. Malgré cela, dans notre approche du problème, il reste le juge de paix quant aux réelles conséquences des variations d'humidité sur son fonctionnement et quant à la pertinence de les prendre en compte dans le futur dans le contrôle moteur.

Après quelques rappels succincts sur les moteurs à allumage commandé, nous présentons le banc d'essai moteur de l'IMFT. Enfin, nous présentons les résultats concernant les effets de l'humidité de l'air sur les performances et les émissions polluantes du moteur.

3.1 Les moteurs à allumage commandé

Afin de mieux comprendre la suite de l'étude, un rappel général sur les moteurs à allumage commandé est donné. Les moteurs à allumage commandé sont des systèmes qui dépendent de beaucoup de paramètres. Pour rester le plus général possible, une description et le fonctionnement du moteur sont exposés dans un premier temps.

3.1.1 Description

Le moteur AC est un moteur alternatif à combustion interne où le système gazeux est renouvelé à chaque cycle ce qui nécessite une admission et un échappement. L'apport d'énergie a lieu par combustion du système gazeux, combustion initiée par un système d'allumage d'où son nom de moteur AC. La combustion du mélange carburé a lieu à l'intérieur d'un cylindre dans lequel se déplace un piston en mouvement alternatif (Fig 3.1). Les deux limites extrêmes du mouvement sont appelées respectivement point mort haut (PMH) et point mort bas (PMB).

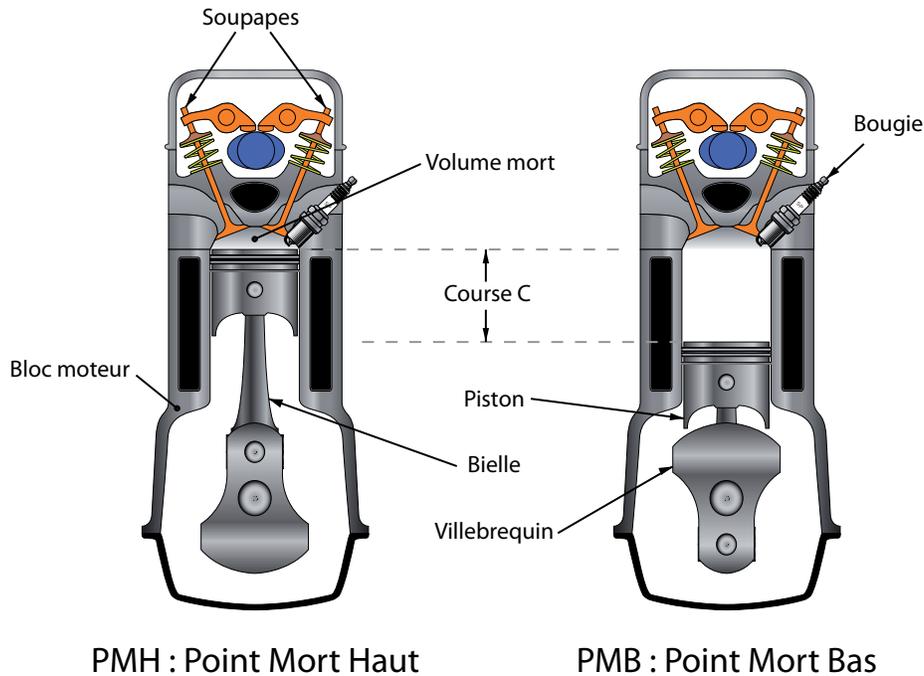


FIG. 3.1 – Ensemble cylindre-piston-culasse

Au point mort haut, le volume résiduel est appelé volume mort ; il détermine ce que l'on nomme la chambre de combustion. Du volume mort V_m et de la cylindrée V se déduit le rapport volumétrique de compression :

$$\tau = \frac{V_m + V}{V_m} \quad (3.1)$$

Le mouvement alternatif du piston est transmis sous forme de rotation à l'arbre moteur, ou encore vilebrequin, par l'intermédiaire d'une bielle.

Le moteur est alimenté avec un mélange air-carburant réalisé soit avant son introduction dans le cylindre (mélange préalable), soit dans le cylindre (injection directe). La quantité d'air admise est modulée par un volet situé dans la tubulure d'admission (le papillon) et le carburant est dosé par un système d'injection. La proportion entre combustible et carburant n'est pas constante et constitue la richesse du mélange carburé. Le remplissage en air est le rapport entre la masse d'air réellement présente dans le cylindre et la masse idéale qu'il contiendrait dans des conditions standards (1 atmosphère, 20°C par exemple). Le couple et la puissance délivrés par le moteur sont directement proportionnels au remplissage en air. A l'intérieur du cylindre, l'air et le carburant vaporisés se transforment en un mélange gazeux homogène (cas idéal) et combustible, l'allumage peut être alors déclenché en provoquant une élévation locale de température, créant ainsi un noyau enflammé, puis un front de flamme se propageant dans le volume de la chambre. Le moment d'allumage est donc contrôlable, d'où la dénomination de ce type de moteur. Le moyen habituellement choisi pour cela est de provoquer une étincelle électrique (avec une bougie) en un point de la chambre de combustion.

L'instant d'allumage (avance à l'allumage) détermine le calage de la combustion dans le cycle moteur et il est éminemment variable. En effet, il doit tenir compte de la durée de combustion, qui elle-même, dépend de nombreux paramètres (humidité?), les principaux étant le régime et la charge. Grâce à l'électronique, il est maintenant possible de prendre en compte beaucoup d'autres paramètres mesurés au moyen de capteurs (température de l'air, de l'eau, angle de rotation, position de l'accélérateur, ...), mais aussi d'intégrer des lois d'avance finement optimisées (cartographies d'avance).

Afin d'avoir un meilleur remplissage des cylindres, il faut prendre en compte l'inertie des gaz. Les soupapes d'admission et d'échappement peuvent être ainsi ouvertes en même temps, c'est ce que l'on appelle le croisement des soupapes. Le diagramme de distribution (des gaz) du moteur est représenté sur Fig. 3.2.

3.1.2 Fonctionnement

Un moteur à allumage commandée est une machine thermodynamique qui fonctionne suivant le cycle théorique de Beau de Rochas (Fig.3.3). Il comprend les phases suivantes :

- a → b : admission du mélange à pression constante
- b → c : compression isentropique
- c → d : combustion isochore

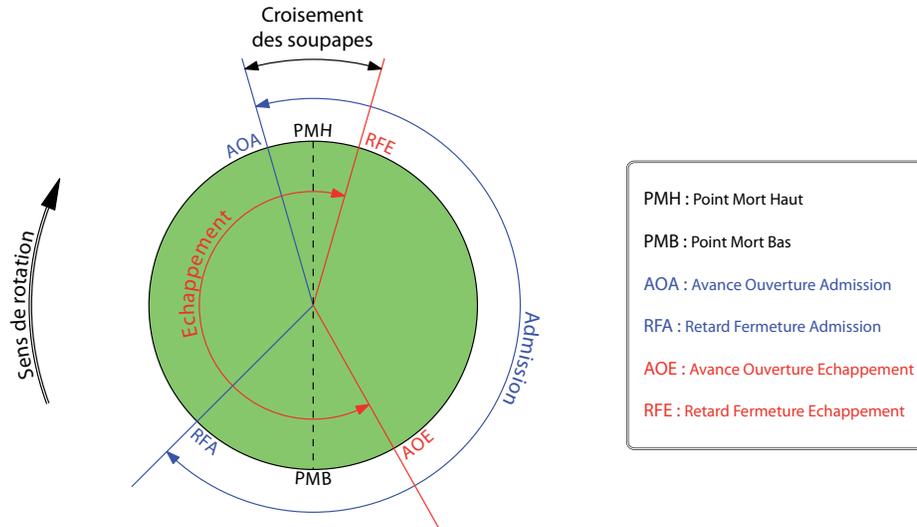


FIG. 3.2 – Diagramme de distribution

- d → e : détente isentropique (temps moteur)
- e : ouverture de la soupape d'échappement
- e → b : détente sans travail
- b → a : échappement des gaz brûlés à pression constante.

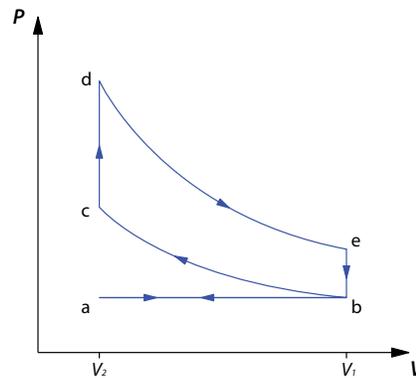


FIG. 3.3 – Diagramme PV du cycle de Beau de Rochas

Son rendement théorique ne dépend que du rapport volumétrique τ (Eq. 3.1) donc que du taux de compression P_c/P_e (Fig. 3.3).

La majorité des moteurs AC fonctionne selon un cycle réel à 4 temps [39], qui dure 2 tours moteur (2 tours vilebrequin) et dont les phases caractéristiques sont les suivantes (Fig. 3.4).

- **Temps 1 : Admission.** Elle se produit alors que le piston descend du PMH au PMB, créant ainsi une dépression dans le cylindre et l'aspiration du mélange carburé.

- **Temps 2 : Compression-allumage.** Les soupapes étant fermées, le piston remonte vers le PMH en comprimant la masse gazeuse enfermée. La pression dans le cylindre croît. L'allumage intervient quelques instants (avance à l'allumage) avant le PMH (10 à 30°V) afin de prendre en compte le délai nécessaire au développement de la combustion.
- **Temps 3 : Combustion-détente.** La combustion se développe et la pression croît rapidement pour arriver normalement à son maximum une dizaine de degrés après le PMH. Les gaz sont à ce moment très chauds (2000 à 3000 K) et les transferts thermiques vers les parois sont intenses. Le piston descend ensuite vers le PMB, la pression et la température des gaz décroissent en même temps que le travail fourni au piston.
- **Temps 4 : Echappement.** La soupape d'échappement s'ouvre lorsque le piston atteint le PMB, les gaz de combustion s'évacuent, au début sous l'effet de leur propre pression, puis sous la poussée du piston qui remonte.

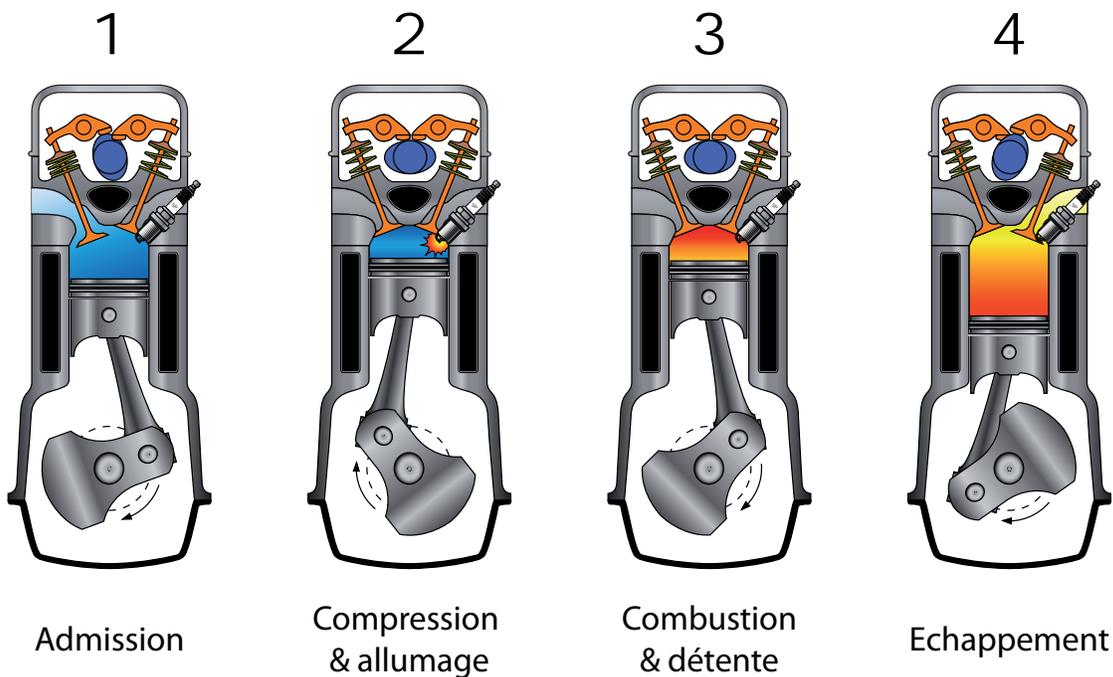


FIG. 3.4 – Cycle à 4 temps du moteur AC

3.2 Le dispositif expérimental

Un banc d'essai moteur est un système regroupant différents éléments interagissant entre-eux, cela partant bien sûr du moteur, jusqu'à l'ordinateur d'acquisition. Le schéma synoptique

de l'installation présenté sur Fig 3.5, révèle la complexité d'une telle installation. Les éléments composant l'installation sont décrits dans les paragraphes suivants.

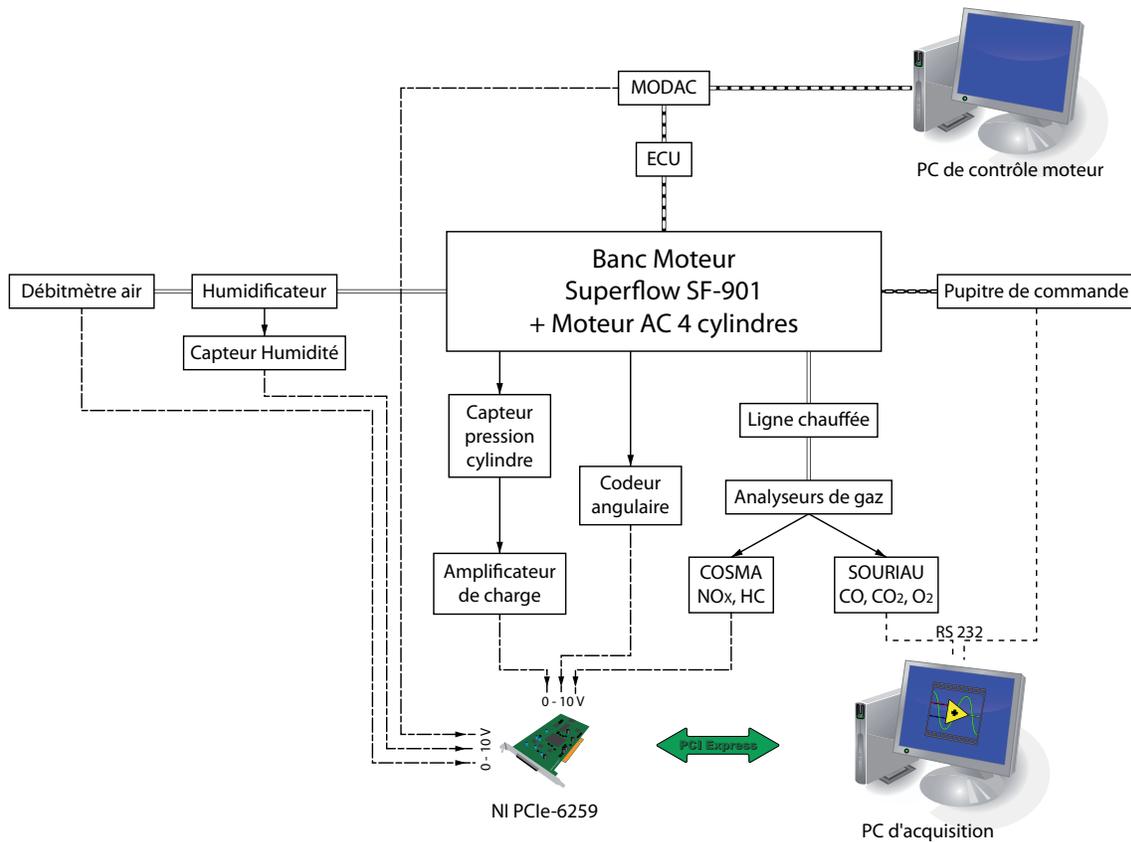


FIG. 3.5 – Schéma synoptique de l'ensemble de l'installation expérimentale

3.2.1 Le moteur

Le moteur, équipant l'installation expérimentale développée à l'IMFT et utilisée pour cette thèse, est un moteur Renault à allumage commandé. Il s'agit ici d'un moteur essence de série de moyenne cylindrée dont les principales caractéristiques sont données dans le tableau 3.1

Le contrôle moteur est assuré par un ordinateur Siemens Sirius 32, qui a pour particularité d'être destiné au développement et à la mise au point moteur, permettant de faire fonctionner le banc moteur en boucle ouverte. Sa particularité par rapport à un ordinateur d'origine concerne l'intégration d'une mémoire de type RAM pour le programme et les calibrations (réglages). Il est donc possible de modifier en temps réel des paramètres moteurs, tels que les durées d'injections ou l'avance à l'allumage. Le dialogue avec l'ordinateur est réalisé par un outil de mise au point : le MODAC (MODular DATA Controller). Ce MODAC est composé d'une interface avec l'unité

Type du moteur	Renault K4M-700
Nombre de cylindres	4
Nombre de soupapes	16
Cylindrée	1598 cm ³
Course	80,5 mm
Alésage	79,5 mm
Rapport volumétrique	10 : 1
Puissance maximale	79 kW à 5750 tr.min ⁻¹
Couple maximum	148 Nm à 3750 tr.min ⁻¹

TAB. 3.1 – Caractéristiques principales du moteur installé à l’IMFT

électronique de contrôle moteur PIA (Parallel Interface Adapter) ainsi que d’un ordinateur muni d’un logiciel d’interface (HP-CS) permettant de visualiser et modifier les variables du calculateur en temps réel.

Le moteur est implanté sur un banc d’essais SuperFlow SF901 (Fig 3.6). Ce banc est conçu pour accueillir des moteurs d’une puissance maximale de 700 kW et de 10 000 tr.min⁻¹ de régime maximum. Le frein hydraulique peut prendre en charge un couple maximum de 1350 Nm.

Outre la mesure du régime moteur et du couple, ce banc intègre un ensemble de capteurs pour mesurer les températures d’eau, d’huile et d’échappement ainsi que les pressions d’essence et d’huile. Toutes ces données peuvent être enregistrées en temps réel par le système d’acquisition. Par ailleurs, un pupitre de commande permet un affichage de ces données ainsi qu’un pilotage du moteur par action sur l’ouverture du papillon.

3.2.2 Système d’humidification

Un humidificateur par évaporation a été conçu et installé pour ces travaux sur l’admission du moteur. Ce système ne nécessite pas de générateur d’air (type soufflante ou air comprimé). En effet le moteur utilisé pour ces travaux est un moteur atmosphérique qui crée une dépression dans la pipe d’admission, ce qui permet d’aspirer l’air à l’entrée d’air du moteur. Cette dépression est transmise jusqu’à l’entrée d’air de l’humidificateur par une canalisation hermétique. L’ajout de cette canalisation et de la cuve introduit une nouvelle perte de charge à l’admission mais reste très faible (de l’ordre de quelques millibars).

Une pièce en téflon servant de support à un élément chauffant est fixée à l’entrée d’air de l’humidificateur. Cette pièce dispose aussi de plusieurs trous permettant le passage d’un flux d’air. Cependant le plus grand débit d’air passe par l’élément chauffant fixé au milieu de la pièce. Ce flux permet à la fois de refroidir la pièce téflon, mais aussi de limiter le flux d’air



FIG. 3.6 – Implantation du moteur sur le banc d'essai SuperFlow SF901

passant par l'élément chauffant. Une vue détaillée de cette pièce est donnée sur la Fig 3.7. Un coude en acier inoxydable est fixé à la sortie de la pièce en téflon. L'autre extrémité du coude est à 10 mm au dessus de la surface d'eau contenue dans la cuve (Fig.3.8). En modifiant l'orientation du coude, la teneur en eau à la sortie de la cuve est modifiée. Si le coude est orienté vers le haut l'air sortant de la cuve sera très peu chargé en eau, en revanche si le coude est orienté vers le bas (et donc vers l'eau contenue dans la cuve) l'air sortant de la cuve sera très chargé en eau. On peut donc jouer entre ces deux positions pour faire varier la teneur en eau de l'air en sortie de cuve.

Cependant, le facteur limitant ce type de système d'humidification est lié au phénomène d'évaporation de l'eau à sa surface. Pour augmenter l'évaporation, une solution simple consiste à augmenter la température de l'eau, c'est la solution qui est utilisée ici. Une vue complète de l'humidificateur est présentée sur la Fig 3.8.

Ce système d'humidification permet de monter jusqu'à une humidité spécifique de 60 g.kg^{-1} à une température de 330 K . En revanche il n'est pas possible de faire un point de mesure à un taux d'humidité plus bas que celui de l'air ambiant ($s_H \approx 10 \text{ g.kg}^{-1}$).

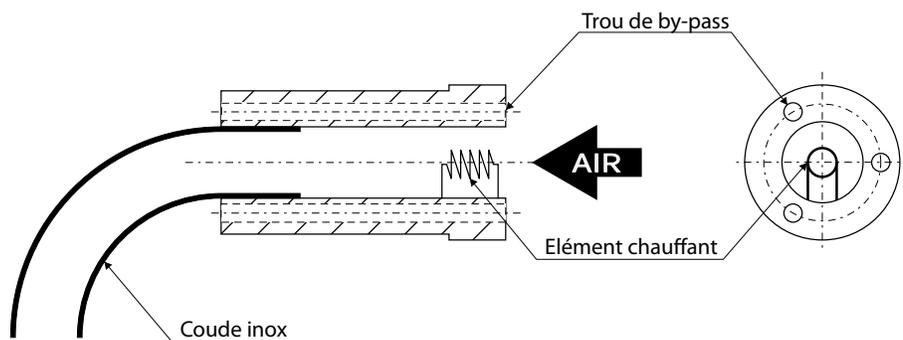


FIG. 3.7 – Vue de coupe de la pièce téflon

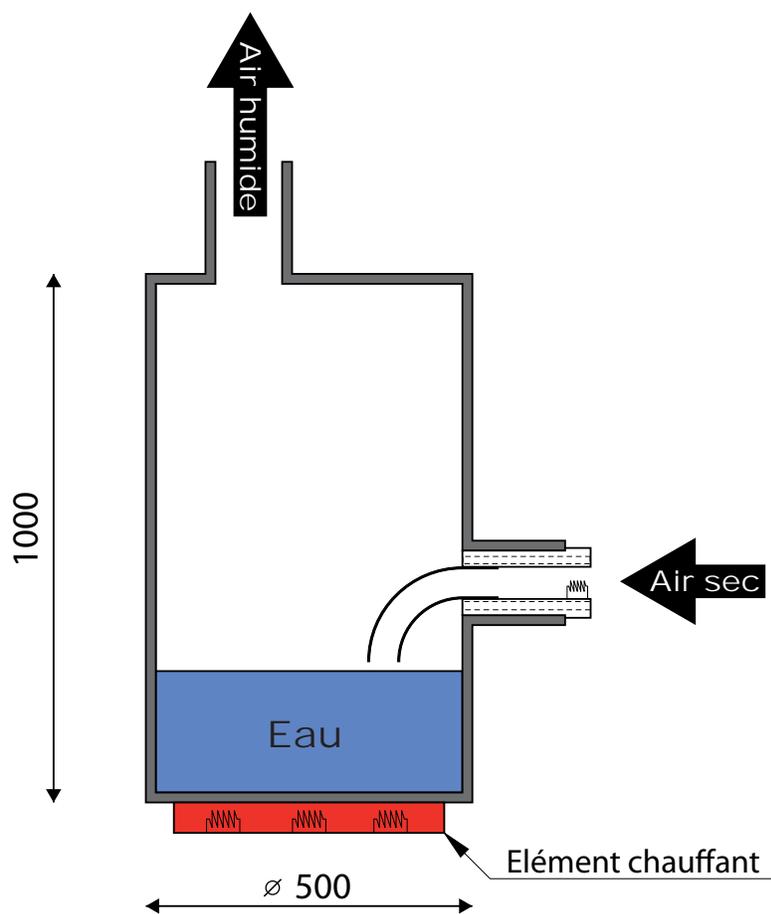


FIG. 3.8 – Vue de principe de l'humidificateur (cotes en mm)

3.2.3 Capteurs et appareils de mesure

3.2.3.1 Banc d'essai

Différents types de mesures sont effectués par le banc :

- Vitesse de rotation du moteur (tr.min⁻¹),
- Puissance du moteur (kW),
- Couple effectif (N.m),
- Température d'admission (K),
- Température échappement à chaque cylindre (K),

Les données sont affichées en temps réel sur le pupitre de commande et sont aussi récupérées sur le PC d'acquisition par une liaison série (RS-232).

3.2.3.2 Pression cylindre

La pression régnant dans la chambre de combustion est un paramètre décisif dans le fonctionnement d'un moteur à allumage commandé. En effet le travail fourni par le moteur est directement lié à la pression cylindre. La pression cylindre est mesurée en temps réel par un capteur de pression piézo-électrique relatif AVL[®] GU12P implanté dans une bougie AVL[®] ZF41 (Fig 3.9). Son étendue de mesure est de 0 à 200 bar pour une sensibilité de 15 pC.bar⁻¹. Le signal est conditionné par un amplificateur de charge Kistler[®] 5011 (sortie tension 0 - 10 V). Ce type de capteur ne donnant que la pression relative, le signal est recalé en absolu, par post-traitement, sur la pression régnant dans le collecteur d'admission mesuré par un capteur piézo-résistif absolu Kistler[®] 4045A2. L'instant de recalage correspond à la fermeture de la soupape d'admission ($P_{\text{cylindre}} = P_{\text{admission}}$). La synchronisation et la base de temps des mesures sont données par un codeur angulaire installé sur l'arbre vilebrequin. La résolution est de 0,35°vilebrequin (2048 créneaux par cycle). Le top cycle est synchronisé sur le point mort haut (PMH) du cylindre sur lequel est installée la bougie instrumentée.

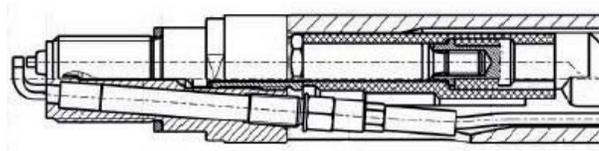


FIG. 3.9 – Bougie instrumentée AVL

3.2.3.3 Capteur d'humidité

La mesure de la teneur en eau à l'admission d'air du moteur est effectuée par un capteur Humirel[®]. C'est un capteur d'humidité relative de type capacitif et la constante du diélectrique

qui compose ce capteur dépend de l'humidité. Il délivre une tension continue proportionnelle à l'humidité relative. Le capteur est fixé sur une bride conçue spécialement à cet usage, placée entre la cuve de tranquillisation et le moteur. La canalisation où est montée cette bride est transparente (Fig 3.10) afin de visualiser toute apparition de condensation en paroi pour éviter une admission de gouttes d'eau directement dans le moteur.

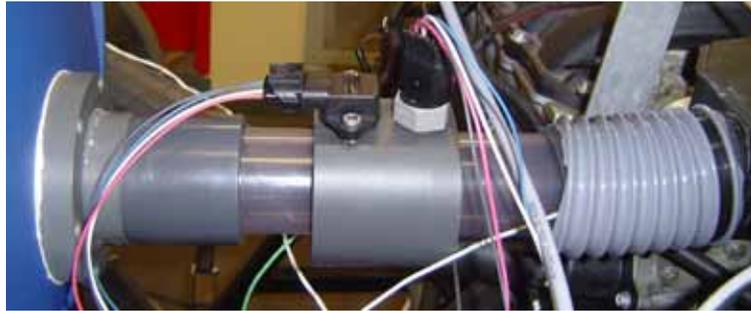


FIG. 3.10 – Implantation du capteur d'humidité

3.2.3.4 Analyseurs de gaz

Bien qu'un seul analyseur classique 5 gaz (de type de analyseur de gaz d'échappement utilisé en maintenance automobile) permettrait une analyse complète des gaz d'échappement, le laboratoire a opté pour différents analyseurs bien adaptés à la mesure de chaque composé. Ainsi, trois analyseurs permettent simultanément l'analyse des hydrocarbures méthaniques et non méthaniques, des oxydes d'azote ainsi que des gaz carbonés et de l'oxygène. Les gaz sont prélevés directement dans le collecteur d'échappement à des températures de l'ordre de 600 à 800°C par une canne chauffante, réglée à une température de 180°C, afin d'éviter toute modification de la composition des gaz entre le moteur et les analyseurs; en particulier dans le cas d'une condensation de l'eau en paroi qui pourrait piéger certains composés.

a. Analyse des oxydes d'azote

Les concentrations en oxydes d'azote (NO, NO_x) sont mesurées par un analyseur Cosma[®] Topaze 3010. Le principe de mesure repose sur la chimiluminescence. La réaction chimique mise en jeu ici se produit sur le NO.



L'oxydation de NO par l'ozone conduit à NO₂ dans un état excité, qui revient à l'état fondamental par émission d'un photon. La quantité de photon émis représente la quantité de NO présent dans les gaz. Pour mesurer la concentration de NO₂ le gaz est d'abord envoyé dans un four à catalyse en molybdène chauffé à haute température où tous les oxydes d'azote sont alors réduits en NO.

L'étendue de mesure est de 10 000 ppm avec une erreur inférieure à 1% de la valeur lue. Trois différents gaz sont nécessaires pour le fonctionnement de cet analyseur : de l'azote pour le réglage du zéro, un gaz étalon (azote chargé à 900 ppm de NO) et aussi de l'oxygène pour la fabrication de l'ozone.

b. Analyse des hydrocarbures imbrûlés

Les concentrations d'hydrocarbures imbrûlés sont mesurées par un analyseur Cosma[®] Graphite 355. Le principe de mesure utilisé est un détecteur à ionisation de flamme (FID). Les hydrocarbures imbrûlés contenus dans le gaz échantillon sont brûlés dans une flamme alimentée par un mélange d'hydrogène et d'hélium avec de l'air synthétique en tant que comburant. Lors de la fracture (provoquée thermiquement) des hydrocarbures, des ions positifs ou négatifs sont libérés et captés par un jeu d'électrodes, le courant créé par ces ions est proportionnel à la masse de carbone brûlée. L'étendue de mesure est de 10 000 ppm, en équivalent méthane, avec une erreur inférieure à 1% de la valeur lue. Quatre différents gaz sont nécessaires pour le fonctionnement de cet analyseur : de l'azote pour le réglage du zéro, un gaz étalon (air chargé à 600 ppm de propane), de l'air synthétique et un mélange hydrogène/hélium pour l'alimentation de la flamme.

c. Analyse des gaz carbonés et de l'oxygène

Les concentrations de monoxyde de carbone, de dioxyde de carbone et de l'oxygène sont mesurées par un analyseur 5 gaz Souriau. Les 2 autres gaz mesurés par cet analyseur sont les oxydes d'azotes et les hydrocarbures imbrûlés mais avec une précision inférieure aux deux analyseurs de gaz Cosma décrit ci-dessus. Ainsi seules les mesures de CO, de CO₂ et de O₂ sont réalisées par l'analyseur Souriau. Les étendues de mesure du CO, CO₂ et O₂ sont respectivement de 10%, 20% et 25% avec une précision de 0,01%, 0,1% et 0,1% respectivement.

3.2.3.5 Acquisition et procédure expérimentale

L'acquisition de toutes les données provenant des différents appareils de mesures décrits précédemment, est réalisée par un PC dédié uniquement à cet usage. Les données du banc d'essai moteur Superflow[®] et de l'analyseur 5 gaz Souriau sont transmises au PC par liaison série RS-232. Les autres données sont recueillies par une carte d'acquisition National Instrument[®] PCIe-6259 disposant de 32 voies d'acquisition. La Fig 3.11 résume l'ensemble des données acquises au cours d'un essai.

L'acquisition sur le PC est assurée par un programme développé au cours de cette thèse sous LabView[®]. Son interface permet de visualiser en temps réel toutes les données recueillies des différents appareils. Le programme offre trois modes de fonctionnement suivant le type de mesure que l'on veut effectuer. Le premier est une visualisation directe de tous les paramètres dont la pression cylindre et le diagramme de Watt, le second mode permet d'effectuer une recherche de l'optimum de l'avance à l'allumage et le dernier mode est la fonction d'acquisition/sauvegarde

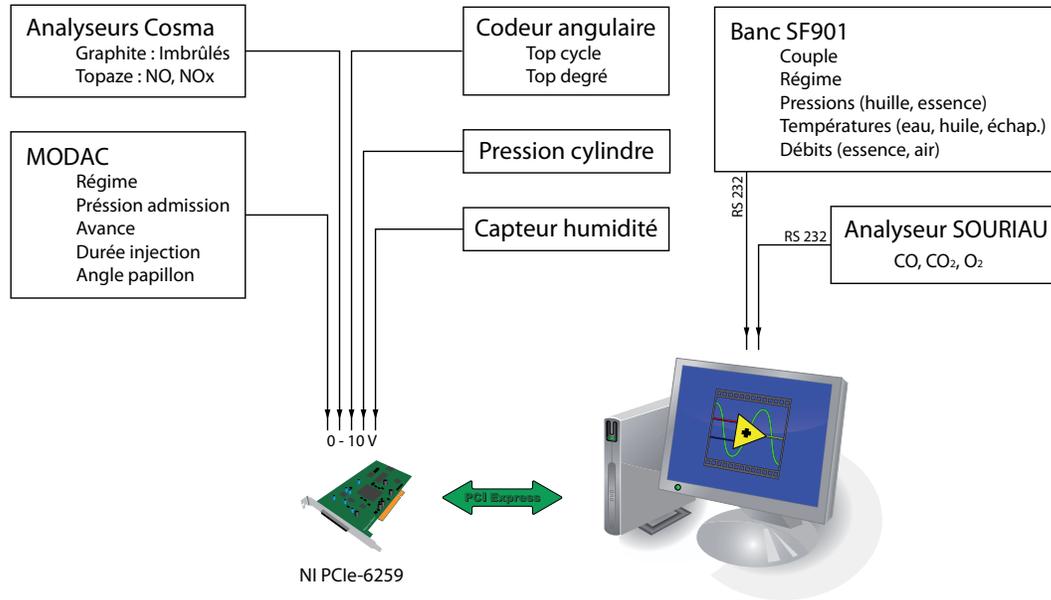


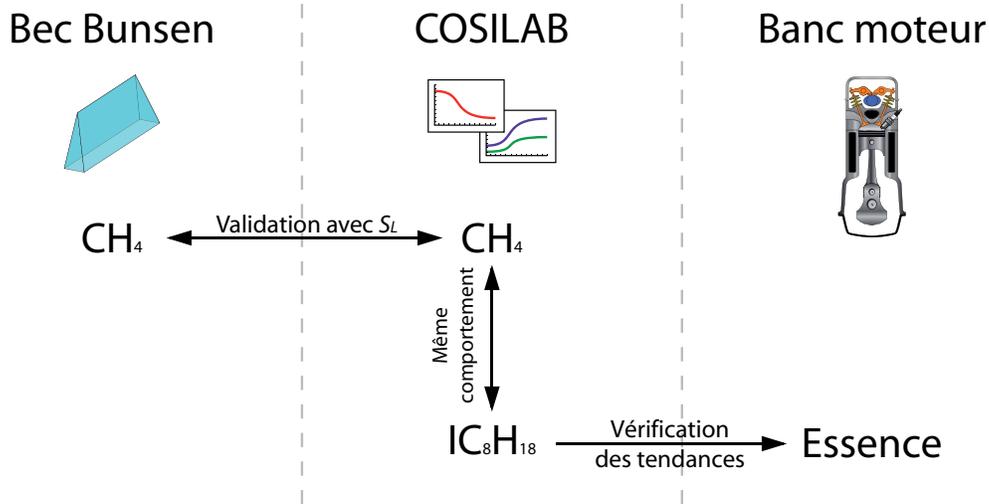
FIG. 3.11 – Synoptique de la procédure d'acquisition

d'un point de fonctionnement du moteur. L'acquisition des données s'effectue sous le programme LabView[®], puis les différents post traitement sont réalisés sous Matlab[®]. L'ensemble de ces programmes a été développé au cours de cette thèse.

3.3 Résultats expérimentaux

Les résultats obtenus expérimentalement et numériquement sur les flammes laminares au chapitre précédent ont mis en évidence les effets importants de l'eau sur la combustion en basse pression ($P = 1$ bar). Les calculs ont confirmé que ces tendances se conservaient lors d'une augmentation de pression, équivalente à celle présente dans les moteurs et pour un carburant proche de l'essence (isooctane). Cependant la combustion dans les moteurs est loin d'être aussi simple que dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée. La première différence vient de la turbulence présente dans les chambres de combustion. Cette turbulence augmente la vitesse globale de combustion et la vitesse de flamme laminaire n'est donc plus le seul paramètre conditionnant le rendement d'un moteur. Les résultats présentés ici dans le cas d'un moteur à allumage commandé vont permettre de confirmer ou non les tendances observées dans le cas laminaire. La Fig. 3.12 rappelle l'organisation du travail effectué pour pouvoir étudier les résultats obtenus sur le banc d'essai moteur.

Pour mener cette étude un seul point de fonctionnement suffit à étudier l'impact de la présence d'eau dans l'air à l'admission du moteur. La modification du régime moteur modifie essentielle-


FIG. 3.12 – Rappel de l'organisation du plan de travail

ment l'aérodynamique interne, ce qui ne concerne pas notre étude. En revanche la modification de la charge appliquée au moteur modifie la pression cylindre et on a montré dans le chapitre précédent que la pression ne modifiait pas les tendances observées sur l'ajout d'eau dans la combustion, ce que nous voulons vérifier. Le point de fonctionnement choisi représente un cas d'utilisation courant d'un moteur à allumage commandé, c'est à dire un régime de 2500 tr.min⁻¹ à mi-charge.

Le point de fonctionnement du moteur pendant ces essais est résumé dans le Tableau 3.2

Variable	Point de fonctionnement
$T_{admission}$	50°C
s_H	11,8 à 40,2 g.kg ⁻¹
Régime	2500 tr.min ⁻¹
Pression à l'admission	710 mbar

TAB. 3.2 – Point de fonctionnement du moteur pendant les essais

La température de l'air à l'admission est fixée à 50°C afin d'augmenter la pression saturante de l'eau et ainsi pouvoir augmenter la teneur en eau de l'air à l'entrée du moteur. En revanche l'humidité spécifique minimale est fixée par les conditions atmosphériques lors des essais, car le banc est dépourvu d'assécheur d'air. Ces conditions atmosphériques lors des essais étaient une température de 22°C, une humidité relative de 72% à cette température soit une humidité spécifique de 11,8 g.kg⁻¹. L'augmentation de la température de l'air à l'entrée d'air du moteur (de 22 à 50°C) modifie les performances moteur ainsi que les émissions polluantes, mais cela ne gêne en rien cette étude car tous les résultats seront comparés à un point de référence à cette

température, soit 50°C.

3.3.1 Performances moteur

Deux effets ont été observés en ajoutant de la vapeur d'eau dans des flammes laminares iso-octane/air : une diminution de la vitesse laminaire de flamme (Fig. 2.16) et une diminution de la température de fin de combustion (Fig. 2.18). Ces deux paramètres (S_L et T_{adiab}) doivent avoir une influence directe sur les performances d'un moteur à allumage commandé, tant sur la puissance du moteur suite à la baisse de la température de combustion, que sur la durée de combustion directement liée à la vitesse de la flamme.

3.3.1.1 Avance à l'allumage

La durée de combustion dans un moteur à allumage commandé doit être la plus courte possible. Cette durée dépend de plusieurs paramètres tels que :

- l'aérodynamique au sein de la chambre de combustion,
- la combustion elle-même et donc la nature du carburant,
- la composition du comburant, à savoir l'air.

Suivant les valeurs de ces paramètres, la durée de combustion peut varier, ce qui aura pour effet de déplacer, dans le cycle thermodynamique moteur, le pic de pression. Or la pression maximale doit être phasée par rapport à la position bielle/manivelle afin d'offrir la meilleure transmission des forces. Ce phasage est réalisé en décalant le cycle de combustion et donc en modifiant l'avance à l'allumage. Cette avance s'exprime en degré vilebrequin (°vil). Elle définit l'instant auquel est initié la combustion dans le cycle moteur. A chaque point de fonctionnement du moteur (charge, régime, ...) correspond une avance à l'allumage optimale permettant d'obtenir le meilleur couple à la sortie du moteur. Le rôle du calculateur est de donner une avance à l'allumage la plus proche possible de cette valeur optimale. Pour cela le calculateur dispose d'une cartographie (sous forme de table) de l'avance qu'il vient corriger en fonction de données issues de capteurs moteur tels que le capteur de cliquetis, la sonde de richesse (sonde λ) ou encore la sonde de température de l'air à l'admission. Cependant aucune mesure de l'humidité de l'air à l'entrée d'air du moteur n'est prise en compte dans le calculateur.

Afin d'observer si l'ajout d'eau à l'entrée d'air du moteur modifie ou non l'avance à l'allumage optimale, deux tests sont effectués. Le premier est de regarder quel est le comportement du calculateur en boucle fermée (avance à l'allumage, temps injection, ...) face à une augmentation du taux d'humidité. Le second test est de placer le calculateur en boucle ouverte et de chercher pour chaque valeur d'humidité l'avance à l'allumage optimale.

L'avance à l'allumage optimale correspond à l'avance pour laquelle on obtient le meilleur couple effectif en sortie moteur. La Fig. 3.13 donne un exemple de la variation du couple en

fonction de l'avance à l'allumage. On observe alors une courbe dite usuellement "en cloche" où le maximum correspond à l'avance optimale pour ce point de fonctionnement.

Un des facteurs limitant dans l'augmentation de l'avance à l'allumage est l'apparition de cliquetis dans les cylindres. Ainsi lors de certains essais pour la recherche de l'avance optimale, nous avons observé ce phénomène. L'avance à l'allumage optimale pour certains points de fonctionnement à humidité élevée, se trouve assez proche de l'avance à laquelle apparaît le cliquetis. Une attention particulière a été portée sur ce point lors des essais pour ne pas endommager le moteur. En effet, le calculateur moteur étant en boucle ouverte lors de certains essais, il ne peut alors pas modifier l'avance pour éliminer le phénomène de cliquetis.

Pour un fonctionnement en boucle fermée, le calculateur ne modifie pas l'avance à l'allumage malgré la modification de l'humidité à l'entrée d'air du moteur. La Fig. 3.14 représente l'évolution de l'avance à l'allumage optimale en fonction de l'humidité spécifique. Pour le point de fonctionnement choisi (Tableau 3.2) l'avance donnée par le calculateur est de 27,4°vil (trait continu sur Fig. 3.14). En revanche l'avance à l'allumage optimale (obtenue en boucle ouverte) est modifiée par la présence d'eau dans l'air admis par le moteur. L'écart entre l'avance optimale et l'avance donnée par le calculateur peut aller jusqu'à 4,3 °vil : cette différence entraîne une perte de couple de 1,5% par rapport au fonctionnement optimal du moteur. Il est aussi à remarquer que la sensibilité de l'avance à l'allumage par rapport à l'humidité spécifique est d'ordre 1.

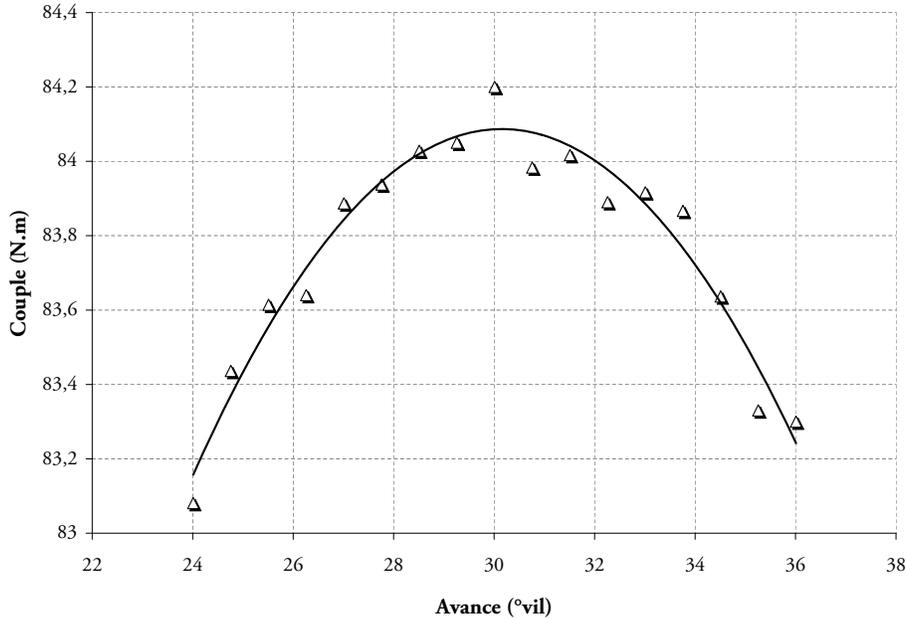


FIG. 3.13 – Couple effectif en fonction de l'avance à un point de fonctionnement à 2500 tr.min⁻¹, mi-charge et $s_H=28$ g.kg⁻¹ ($H_r = 38\%$). Légende : "Δ" Données expérimentales ; "—" Courbe de régression

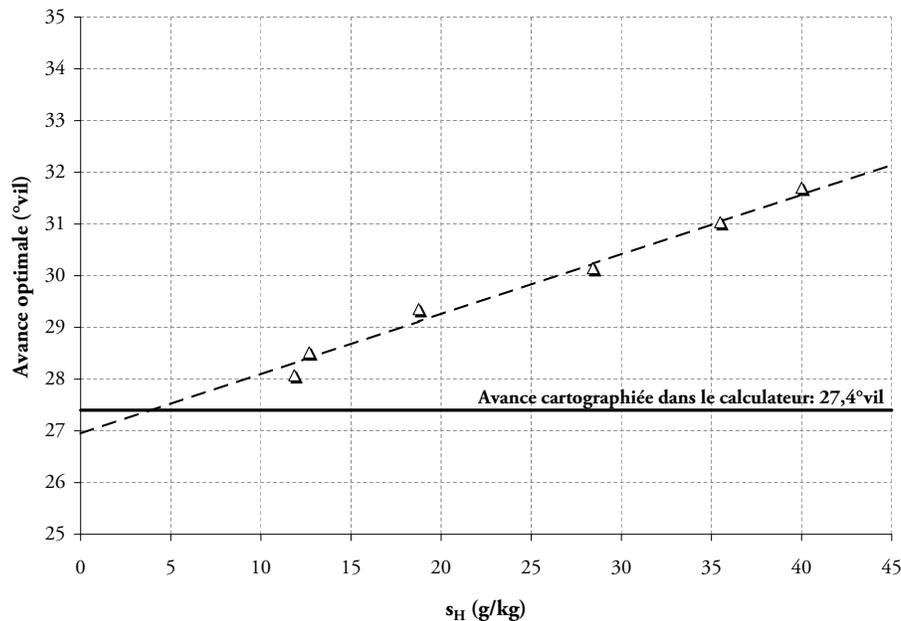


FIG. 3.14 – Effet de s_H sur l'avance optimale à l'allumage. Légende : " Δ " Données expérimentales (BO); "- -" Régression linéaire; "—" Avance du calculateur en boucle fermée

L'augmentation de l'avance optimale à l'allumage peut s'expliquer par l'augmentation de la durée de combustion due à une diminution de la vitesse de flamme ainsi que nous l'avons prévu dans le cadre d'une flamme laminaire prémélangée (section 2.5.2). L'ajout d'eau à l'entrée d'air d'un moteur modifie donc l'avance à l'allumage optimale en ralentissant la vitesse de combustion.

3.3.1.2 Pression cylindre maximale

La figure 3.15 montre comment la pression cylindre maximum varie avec l'humidité s_H . Les mesures sont effectuées pour $T_{gf} = 323$ K et une humidité variant de $s_H = 11,8$ g.kg⁻¹ à 40 g.kg⁻¹. Comme attendu, la pression maximale baisse quand l'humidité spécifique s_H augmente. En passant de 37,5 bar pour $s_H = 11,8$ g.kg⁻¹ à 33 bar pour $s_H = 40$ g.kg⁻¹, elle indique un ralentissement de la combustion quand s_H augmente. Cet effet est cohérent avec la baisse de la vitesse de flamme laminaire S_L observée par exemple pour l'isooctane dans les mêmes conditions (calcul fait dans la section 2.5.2 et représenté sur la figure 2.16). La courbe en trait continu ajouté sur la Fig. 3.15 montre comment S_L varie en fonction de s_H . On observe que les variations de S_L et de P_{\max} (Fig. 3.15) avec s_H sont du même ordre de grandeur. On ne peut pas aller plus loin dans la conclusion car le lien entre S_L et P_{\max} est complexe : il faudrait utiliser un code de calcul de moteur à piston complet pour donner la relation quantitative entre S_L et P_{\max} mais ceci dépasse le cadre de cette thèse. A l'ordre 0, on peut cependant dire que quand l'humidité

de l'air passe de 11,8 g.kg⁻¹ à 40 g.kg⁻¹ dans un moteur, la vitesse de flamme laminaire baisse de 11,6% et la pression maximale baisse de 11,9%, ce qui semble impliquer un lien direct entre ces grandeurs et confirmer que les tendances observées sur les flammes laminaires semblent se traduire directement par des effets du même ordre dans un cas moteur réel.

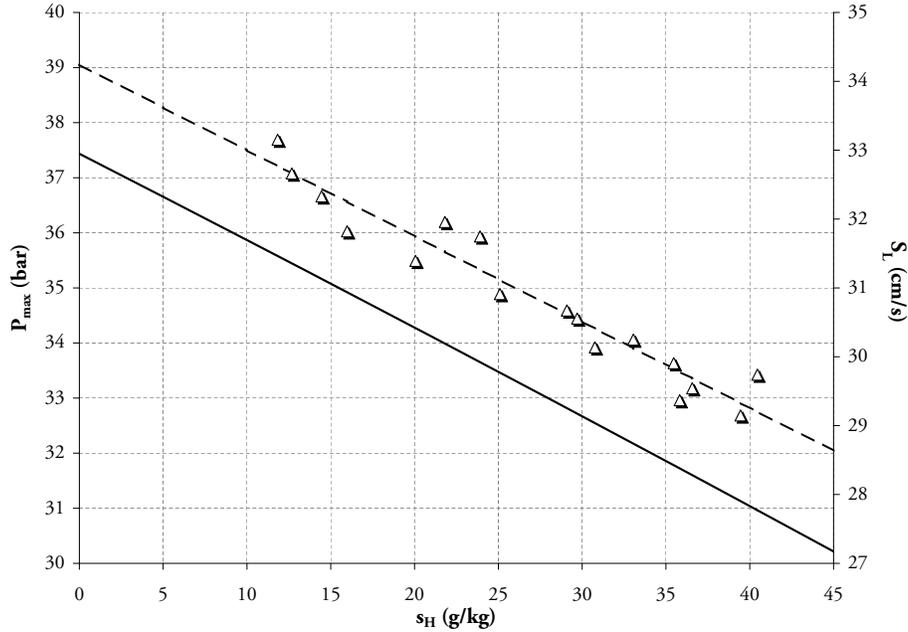


FIG. 3.15 – Effet de s_H sur la pression maximale dans le cylindre. Légende : " Δ " Données expérimentales sur banc moteur ; "- -" Régression linéaire ; "—" Vitesse de flamme laminaire air/isooctane à 323 K

3.3.1.3 Couple moteur

Afin de visualiser uniquement les effets de l'ajout d'eau sur le couple effectif en sortie moteur, l'avance à allumage est, pour ces essais, fixée à l'avance à allumage optimale pour chaque valeur de l'humidité spécifique s_H . La Fig. 3.17 représente l'évolution du couple effectif en sortie du moteur en fonction de l'humidité spécifique à l'entrée d'air du moteur. Le couple en sortie du moteur présente une décroissance linéaire en fonction de s_H . Pour une humidité spécifique passant de 10 à 40 g.kg⁻¹ cette baisse est de 5,5%. Cette diminution est justifiée par la diminution du travail fourni au piston causée par la diminution de la pression maximale dans le cylindre. Ici, par contre, les effets relatifs observés sur S_L à la section 2.4.1 ne se traduisent pas par une baisse proportionnelle du couple : entre $s_H = 0$ et $s_H = 40$ g.kg⁻¹, la vitesse de flamme laminaire air/isooctane baisse de 0,33 à 0,28 m.s⁻¹ (soit environ 15%) alors que le couple du moteur ne baisse que de 88 à 82 N.m soit 5%. Il n'y a pas de raison de chercher ici un lien quantitatif décrit entre ces grandeurs : le fait est que le moteur restitue un effet qualitatif comparable avec le calcul

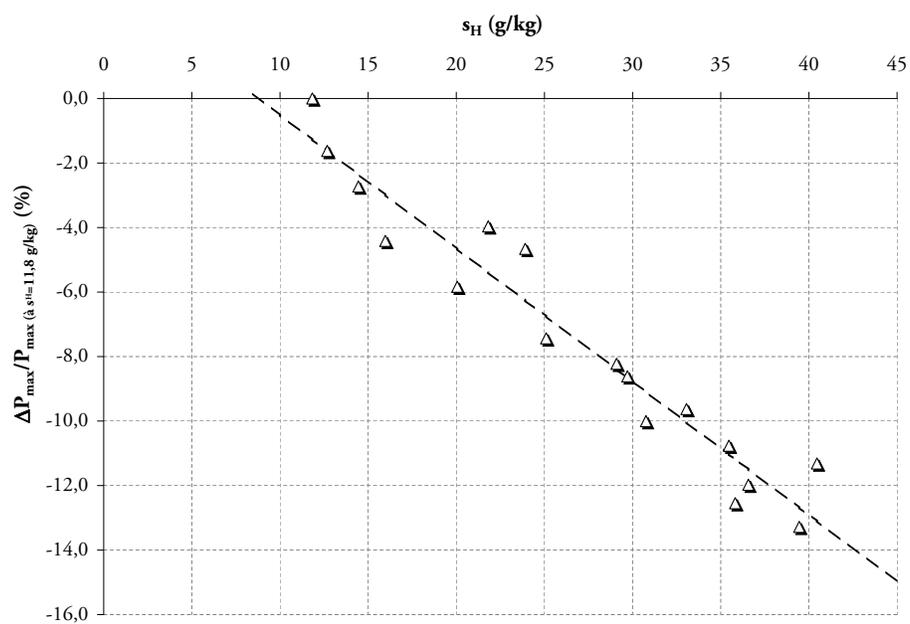


FIG. 3.16 – Variation relative de la pression cylindre maximale. Légende : " Δ " Données expérimentales ; "- -" Régression linéaire

des flammes laminaires.

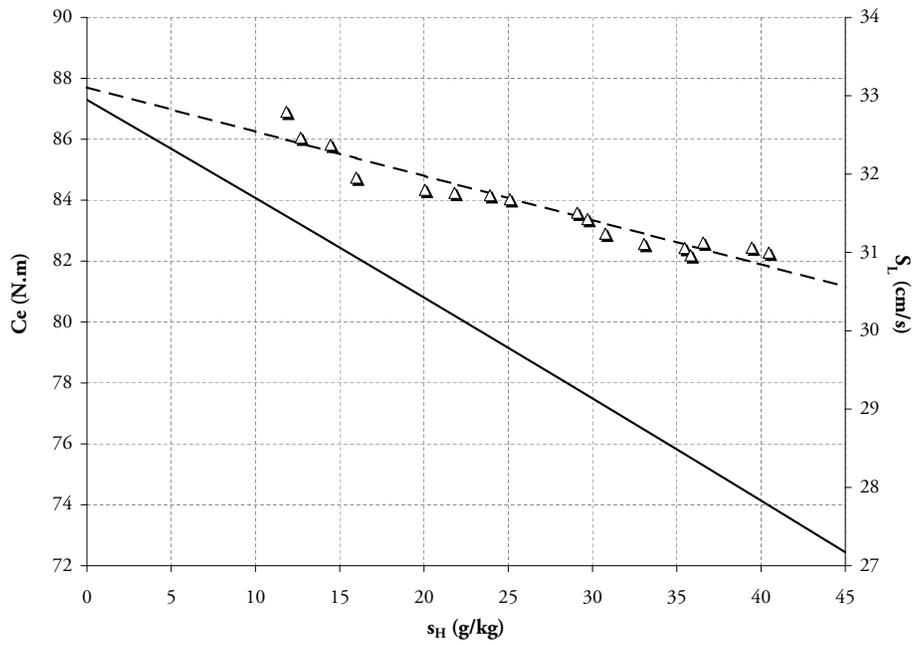


FIG. 3.17 – Effet de s_H sur le couple effectif en sortie moteur. Légende : " Δ " Données expérimentales sur banc moteur ; "- -" Régression linéaire ; "—" Vitesse de flamme laminaire air/isooctane à 323 K.

3.3.2 Émissions polluantes

3.3.2.1 Oxydes d'azote

Comme il a été vu dans la section 2.3.3 la production des oxydes d'azote est liée à trois mécanismes de formation, le prompt NO, les NO_x combustibles et les NO_x thermiques.

Dans un moteur à piston il est très difficile d'obtenir la température des gaz à l'intérieur du cylindre. En revanche il est possible d'avoir une estimation de cette température à partir de la mesure de la pression cylindre à partir de la loi des gaz parfaits (Eq. 1.17).

L'utilité de mesurer la pression cylindre est alors double. Elle permet en premier lieu d'observer les performances moteur (rendement implicitement lié à $P_{\text{cylindre max}}$) mais aussi d'expliquer la production de certains polluants comme les oxydes d'azotes. La Fig. 3.15 montre que la pression maximale dans le cylindre, lors de la combustion, a une forte sensibilité à la présence d'eau dans les gaz frais. En effet une augmentation de s_H de 10 à 40 g.kg⁻¹ provoque une diminution de la pression maximale dans le cylindre de 12% (Fig. 3.16).

La diminution de pression dans le cylindre induit (Eq. 1.17) une diminution de la température dans le cylindre. Cette forte diminution de la température doit avoir un effet notable sur la production de certains polluants, notamment les oxydes d'azotes et les mesures faites au banc moteur (Fig. 3.18) montrent en effet que l'ajout d'eau dans les gaz frais à l'entrée d'air du moteur a pour effet de fortement diminuer les émissions d'oxydes d'azote. Cette diminution est en accord qualitatif avec les résultats obtenus numériquement dans le cadre des flammes laminaires prémélangées.

La production des oxydes d'azote est donc très sensible à la présence d'eau dans les gaz frais, ceci étant dû à la diminution de la température adiabatique de combustion.

3.3.2.2 Hydrocarbures imbrûlés

Les émissions d'hydrocarbures imbrûlés proviennent en majorité des phénomènes d'extinction en proche paroi et dans une moindre mesure de la combustion incomplète. La Fig. 3.20 montre une augmentation des émissions d'hydrocarbures imbrûlés lors de l'ajout d'eau dans les gaz frais. Cette augmentation reste cependant assez faible, de l'ordre de 5%. Les résultats obtenus numériquement dans le cas de la combustion laminaire du méthane montrent aussi une augmentation des HC pour une augmentation de s_H (Fig. 2.23). Le schéma cinétique utilisé pour l'isooctane n'a pas permis d'obtenir de résultats sur les émissions de HC dans une flamme laminaire prémélangée.

Il est difficile d'aller plus loin sans connaître exactement la richesse à laquelle les flammelettes brûlent dans le moteur. En tous cas, les HC observés dans les gaz brûlés sur le moteur semblent augmenter moins vite que dans les cas des flammes laminaires du chapitre 2 (Fig. 2.23). D'autres phénomènes que la combustion doivent intervenir pour la production des HC dans le moteur.

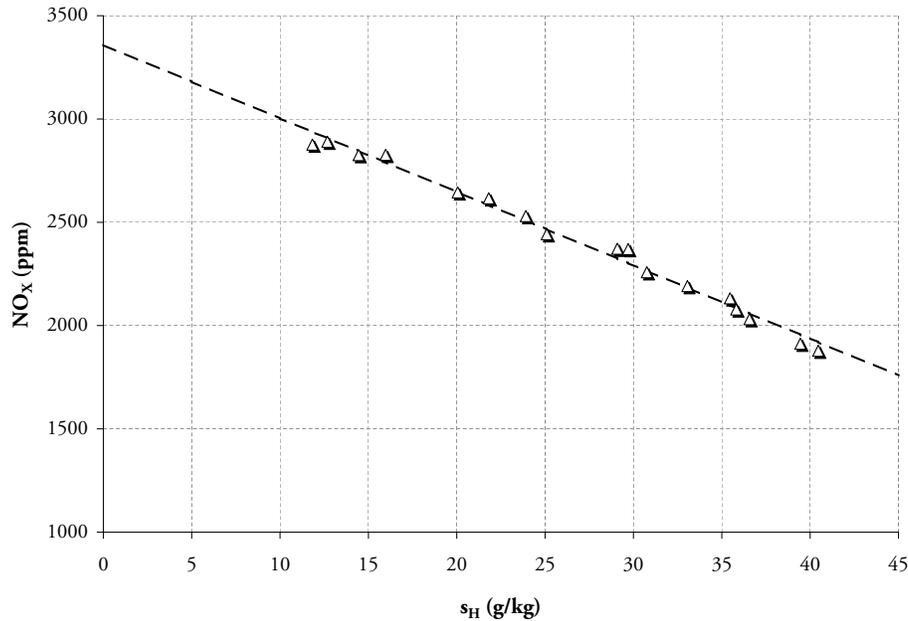


FIG. 3.18 – Effet de s_H sur les oxydes d'azote. Légende : " Δ " Données expérimentales ; "- -" Régression linéaire

Une des explications serait une augmentation du phénomène d'extinction en paroi dû à une augmentation de la capacité calorifique du mélange ou de la zone de coincement au voisinage des parois [6, 7, 73].

3.3.2.3 Monoxyde de carbone

Le CO intervient comme une étape intermédiaire dans le processus d'oxydation des hydrocarbures pour former le CO₂, il n'intervient donc pas directement sur la molécule H₂O mais est influencé par sa présence. Les mesures sur le banc moteur (Fig. 3.21) montrent une diminution des émissions de CO dans les gaz brûlés. On retrouve ici les tendances observées dans le cas de l'isooctane (Fig. 2.22). Le CO émis baisse quand s_H augmente. A nouveau, on constate une corrélation entre les tendances observées sur les flammes laminares (section 2.5.4.2) et le moteur.

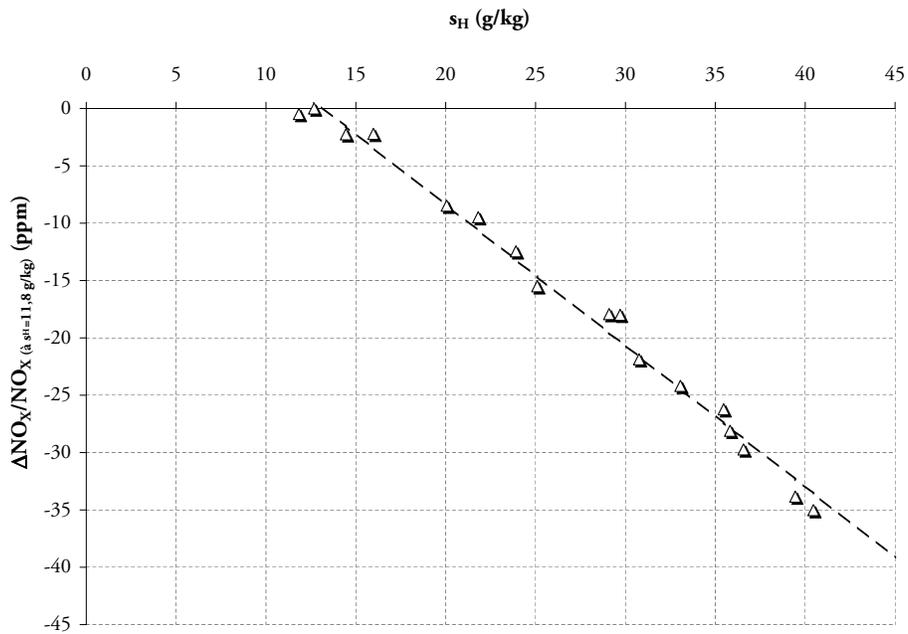


FIG. 3.19 – Variation relative des oxydes d'azote. Légende : "Δ" Données expérimentales ; "- -" Régression linéaire

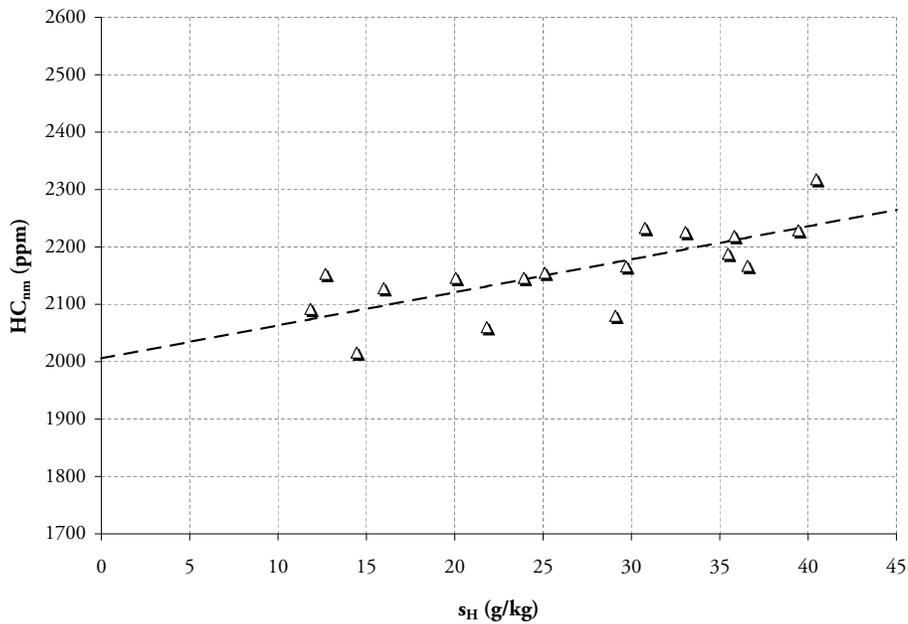


FIG. 3.20 – Effet de s_H sur les émissions d'hydrocarbures imbrûlés. Légende : "Δ" Données expérimentales ; "- -" Régression linéaire

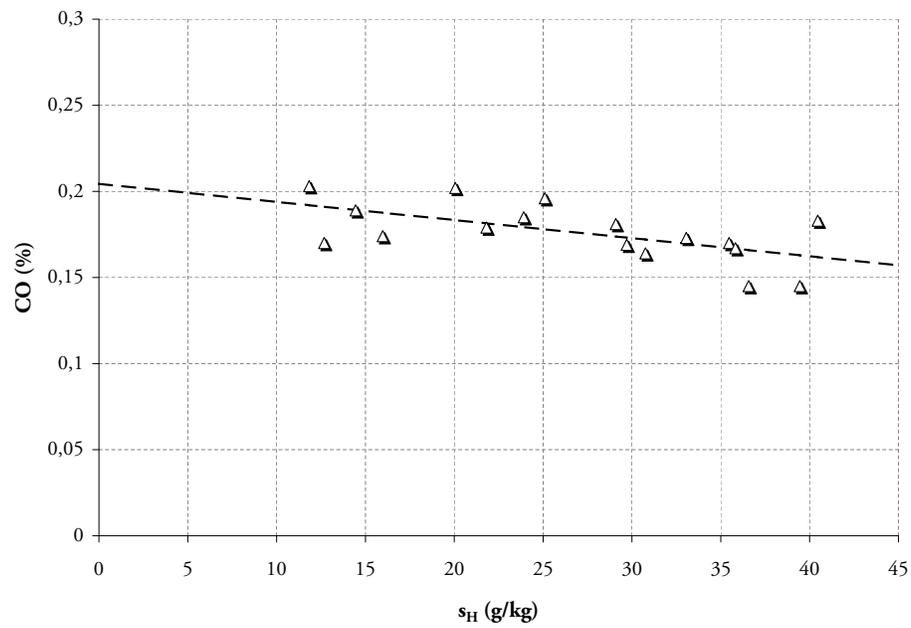


FIG. 3.21 – Effet de s_H sur les émissions de monoxyde de carbone. Légende : "Δ" Données expérimentales ; "- -" Régression linéaire

3.4 Conclusion

Les résultats expérimentaux obtenus sur le banc d'essai recherche de l'IMFT ont permis de confirmer les tendances observées numériquement et expérimentalement dans le cas d'une flamme laminaire prémélangée. La présence d'eau dans l'air à l'admission d'un moteur modifie de multiples façons son fonctionnement aussi bien du point de vue des performances que du point de vue des émissions polluantes.

Les performances sont modifiées par deux variables sensibles à la présence d'eau, la température adiabatique de fin de combustion et la vitesse de flamme laminaire. La température adiabatique de fin de combustion influe sur la quantité de chaleur dégagée lors de la combustion et donc du travail fourni au piston. L'ajout d'eau a pour effet de diminuer cette température et a donc ainsi pour effet de diminuer le travail au piston et donc la puissance (et couple) du moteur. La vitesse de flamme laminaire influe sur la durée de combustion dans le moteur et donc sur le phasage du cycle de combustion par rapport au cycle moteur. Pour recaler ces deux cycles une modification de l'avance à l'allumage est donc nécessaire pour optimiser les performances du moteur.

Les émissions polluantes sont modifiées par plusieurs phénomènes eux mêmes sensibles ou non à la présence d'eau. Les émissions oxydes d'azotes sont majoritairement dues au mécanisme de Zeldovich (NO_x thermique) qui est très sensible à la température des gaz. Or la température adiabatique de fin de combustion est sensible à la présence d'eau dans les gaz frais. Les variations des émissions d'hydrocarbures imbrûlés sont elles plus difficilement explicables. En effet, bien que les résultats expérimentaux et numériques tendent à montrer une augmentation des émissions des HC, les ordres de grandeur ne sont pas les mêmes, les résultats expérimentaux donnant une variation de l'ordre de la centaine de ppm alors que les résultats numériques tendraient à donner une variation très faible. D'autres phénomènes physiques tel que l'extinction en proche paroi accentuée par le changement de la capacité calorifique des gaz frais peuvent être l'explication de cette augmentation.

Conclusion

La présence d'eau dans les moteurs est pour ainsi dire permanente par le simple fait que les moteurs utilisent l'air ambiant comme comburant, lui-même étant soumis aux conditions climatiques où se trouve le moteur. Cela pouvant aller d'un air très sec, correspondant à une belle journée dans un pays où le climat est polaire, à un air très humide correspondant à une journée pluvieuse dans un pays à climat tropical. Le taux d'humidité à l'entrée d'air d'un moteur est une grandeur physique pouvant varier sur des temps assez courts (quelques minutes) à des temps assez longs (plusieurs jours) durant la vie du moteur.

L'objet de cette étude est de déterminer les effets de l'humidité de l'air sur la combustion et plus particulièrement sur le fonctionnement des moteurs à pistons. Deux approches ont été menées de front pour cette étude, une approche numérique modélisant une flamme laminaire de prémélange et une approche expérimentale comportant deux bancs d'essai. Le premier banc expérimental est un brûleur à bec Bunsen dont la conception, le dimensionnement, la réalisation et la validation ont été effectués au cours de cette étude, représentant la plus grande partie de ce travail. Ce brûleur a ensuite permis de mesurer des vitesses de flamme laminaire prémélangée pour les comparer à des résultats obtenus de manière numérique. Le deuxième banc expérimental est un banc d'essai moteur recherche qui a permis de confirmer les tendances observées dans le cas des flammes laminaires.

Les résultats des vitesses de flamme laminaire obtenus expérimentalement, avec le brûleur à bec Bunsen, ont permis de valider le schéma cinétique chimique GriMech 3.0 dans le cas d'un mélange air-humide/méthane à 300 K. La première constatation sur l'ajout d'eau dans les gaz frais a été une forte sensibilité de la vitesse de flamme laminaire. Dans le cas d'une température des gaz frais de 330 K, la vitesse de flamme diminue de plus de 50% pour un mélange passant de 0 à 100% d'humidité relative. L'ajout d'eau dans les gaz frais a ensuite été étudié de manière numérique permettant d'obtenir toutes les caractéristiques de la flamme. La température adiabatique de fin de combustion T_{adiab} est elle aussi dépendante de la quantité d'eau dans les gaz frais : quand la concentration d'eau contenue dans les gaz frais augmente, cette température diminue. La production des oxydes d'azotes est fortement influencée par la présence d'eau dans les gaz frais : pour un changement d'humidité relative de 0 à 100% (à 300 K) les émissions de NO_x diminuent de près de 19%, cette baisse étant due à la baisse de la

température adiabatique de fin de combustion. Les émissions d'hydrocarbures imbrûlés sont elles aussi influencées par la l'humidité présente dans l'air et elles augmentent lors d'une élévation de la teneur en eau dans les gaz frais. La production de monoxyde de carbone est également affectée par la présence d'eau contenue dans les gaz frais, lors d'une augmentation d'humidité relative de 0 à 100% (à 300 K), les émissions de CO diminuent de 20%. La vitesse de flamme laminaire prémélangée, la température adiabatique de fin de combustion et la composition des gaz brûlés sont influencées par la présence d'eau dans les gaz frais et cela même pour de faibles teneurs en eau ($s_H = 21,8 \text{ g.kg}^{-1}$). La sensibilité de certaines grandeurs (NO_X en particulier), vis-à-vis de l'humidité, est dépendante de la température des gaz frais. Une augmentation de la température tend à faire diminuer l'influence de l'humidité sur ces grandeurs. La sensibilité de toutes les grandeurs (S_L , T_{adiab} , NO_X et CO) est atténuée lors d'une compression isentropique des gaz frais. Les calculs effectués dans le cas de l'isooctane ont révélé les mêmes tendances observées que dans le cas du méthane.

Les résultats obtenus sur le banc d'essai moteur recherche ont permis de mettre en évidence une influence de l'humidité de l'air sur les performances moteur et les émissions polluantes. L'ajout d'humidité à l'entrée d'air du moteur a pour conséquence d'augmenter l'avance à l'allumage optimale. Ce résultat est expliqué par la diminution de la vitesse de flamme qui entraîne une durée de combustion plus longue retardant ainsi le pic de pression dans le cylindre : pour recaler le pic de pression l'avance à l'allumage doit être augmentée. La pression maximale dans le cylindre diminue lors de la présence d'eau dans les gaz frais, cela pouvant être expliqué par la diminution de la température adiabatique de fin de combustion. Le couple effectif du moteur est influencé par la présence d'eau à l'admission, car l'augmentation du taux d'humidité provoque une diminution du couple, ceci étant justifié par la diminution de la pression maximale dans le cylindre. Les émissions polluantes sont elles aussi altérées favorablement par la présence d'eau à l'entrée d'air du moteur, les émissions d'oxydes d'azote ainsi que les émissions de monoxyde de carbone sont diminuées lorsque l'humidité de l'air à l'admission augmente, en revanche les émissions d'hydrocarbures imbrûlés augmentent, cette augmentation demeurant néanmoins faible. Tous les phénomènes observés sur le banc d'essai moteur, montrent les mêmes tendances que celles obtenues dans le cadre des flammes laminaires prémélangées.

Cette étude a permis de mettre en évidence l'influence de l'eau sur une flamme laminaire de prémélange ainsi que sur le fonctionnement d'un moteur a allumage commandé. La présence d'eau à l'entrée d'air d'un moteur peut modifier de différentes manières son fonctionnement, aussi bien sur ses performances que sur ses émissions polluantes. La prise en compte de l'humidité de l'air dans les codes de calcul ou/et dans le contrôle moteur peut donc s'avérer être bénéfique pour optimiser leurs performances.

Bibliographie

- [1] K. T. Aung, M. I. Hassan, and G. M. Faeth. Flame/stretch interactions of laminar premixed hydrogen/air flames at normal temperature and pressure. *Combust. Flame*, 109 :1–24, 1997.
- [2] K. T. Aung, M. I. Hassan, and G. M. Faeth. Effects of pressure and nitrogen dilution on flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen air flames. *Combust. Flame*, 112(1) :1–15, 1998.
- [3] J.H. Bell and R.D. Mehta. Boundary-layer predictions for small low-speed contractions. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.*, 27 :372–374, 1989.
- [4] A. Bhargava, M. Colket, W. Sowa, K. Casleton, and D. Maloney. An experimental and modeling study of humid air premixed flames. *J. Eng. Gas Turb. and Power*, 122 :405–411, 2000.
- [5] K. N. C. Bray, M. Champion, and P. A. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In R. Borghi and S.N.B. Murthy, editors, *Turbulent Reactive Flows*, volume 40, pages 541–563. Lecture notes in engineering, Springer Verlag, 1989.
- [6] G. Bruneaux, K. Akselvoll, T. Poinso, and J. Ferziger. Flame-wall interaction in a turbulent channel flow. *Combust. Flame*, 107(1/2) :27–44, 1996.
- [7] G. Bruneaux, T. Poinso, and J. H. Ferziger. Premixed flame-wall interaction in a turbulent channel flow : budget for the flame surface density evolution equation and modelling. *J. Fluid Mech.*, 349 :191–219, 1997.
- [8] H.H. Bruun. *Hot-wire anemometry : Principles and signal analysis*. Oxford Science Publications, 1995.
- [9] J. Buckmaster and A. Crowley. The fluid mechanics of flame tips. *J. Fluid Mech.*, 131 :341, 1984.
- [10] F. Buda, R. Bounaceur, V. Warth, P.A. Glaude, R. Fournet, and F. Battin-Leclerc. Progress toward a unified detailed kinetic model for the autoignition of alkanes from c4 to c10 between 600 and 1200 k. *Combust. Flame*, 142 :170–186, 2005.

-
- [11] R. Bunsen. *Ann. Ch. et Phys.*, 14 :446, 1868.
- [12] R. Bunsen and H. Roscoe. Photochemische untersuchungen. *Annalen der Physik*, 176(1) :43–88, 1857.
- [13] S. M. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame surface area. *Combust. Sci. Tech.*, 70 :1–15, 1990.
- [14] P. Clavin. Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 11 :1–59, 1985.
- [15] P. Clavin. Dynamics of combustion fronts in premixed gases : from flames to detonations. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :569–586, 2000.
- [16] P. Clavin and G. Joulin. Premixed flames in large scale and high intensity turbulent flow. *J. Physique Lettres*, 44 :L1–L12, 1983.
- [17] C. Cohé, C. Chauveau, I Gokalp, and D.F. Kurtulus. Co₂ addition and pressure effects on laminar and turbulent lean premixed ch₄ air flames. *Proc. Combust. Inst.*, 2009.
- [18] J. Corsiglia. *American Gas Association Monthly*, 13(437), 1931.
- [19] COSILAB. The combustion simulation laboratory, www.softpredict.com, rotexo gmbh & co. kg, haan (germany).
- [20] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook. A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation. *Combust. Flame*, 129 :253–280, 2002.
- [21] S.G. Davis and C.K. Law. Laminar flame speeds and oxidation kinetics of iso-octane-air and n-heptane-air flames. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :521–527, 1998.
- [22] B.Z. Dlugogorski, R.K. Hichens, E.M. Kennedy, and J.W. Bozzelli. Propagation of laminar flames in wet premixed natural gas-air mixtures. *Trans IChemE*, 76 :81–89, 1998.
- [23] Y. Dong, C.M. Vagelopoulos, G.R. Spedding, and F.N. Egolfopoulos. Measurement of laminar flame speeds through digital particle image velocimetry : Mixtures of methane and ethane with hydrogen, oxygen, nitrogen, and helium. *Proc. Combust. Inst.*, 29 :1419–1426, 2002.
- [24] D. R. Dowdy, D. B. Smith, and S. C. Taylor. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 325–332. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [25] F.L. Dryer. Water addition to practical combustion systems - concepts and applications. *Symposium (International) on Combustion*, 16 :279 – 295, 1976.
- [26] D. Durox, T. Schuller, and S. Candel. Combustion dynamics of onverted conical flames. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :1717–1724, 2005.

- [27] D. Durox, T. Schuller, N. Noiray, A.L. Birbaud, and S. Candel. The rayleigh criterion in unconfined self-excited oscillating flames. In *Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2007.
- [28] F. Egolfopoulos and C. K. Law. Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin flame technique. In *25th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1341–1347. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994.
- [29] O.C. Ellis and R. V. Wheeler. *J. Chem. Soc.*, 153, 1927.
- [30] M. Frenklach, T. Bowman, G. Smith, and B. Gardiner. Gas research institute, gri-mech homepage : <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>, 2000.
- [31] W.L. R. Gallo. A comparison between the hat cycle and other gas-turbine based cycles : Efficiency, specific power and water consumption. *Energy Conversion and Management*, 38 :1595–1604, 1997.
- [32] V. Giovangigli and M. Smooke. Application of continuation methods to laminar premixed flames. *Combust. Sci. Tech.*, 87 :241–256, 1993.
- [33] P. A. Glaude, R. Fournet, V. Warth, and F. Battin-Leclerc. <http://www.ensic.inpl-nancy.fr/dcpr/anglais/gcr/generatedmecanisms/isooctane>, 2002.
- [34] X. J. Gu, M. Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combust. Flame*, 121 :41–58, 2000.
- [35] H. Guo, W.S. Neil, and G.J. Smallwood. A numerical study on the effect of water addition on no formation in counterflow ch4-air premixed flames. *J. Eng. Gas Turb. and Power*, 130, 2008.
- [36] J.A. Harrington. Water addition to gasoline - effect on combustion, emissions, performance and knock. Technical Report 820314, SAE, 1982.
- [37] M. I. Hassan, K. T. Aung, and G. M. Faeth. Measured and predicted properties of laminar premixed methane/air flames at various pressures. *Combust. Flame*, 115(4) :539–550, 1998.
- [38] C. Hasse, M. Bollig, N. Peters, and H. A. Dwyer. Quenching of laminar isooctane flames at cold walls. *Combust. Flame*, 122 :117–129, 2000.
- [39] J. B. Heywood. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw and Hill Series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, New-York, 1988.
- [40] Hopkinson. A new method of cooling gas engines. *Proceedings of the Institute of Mechanical Engineering*, page 679, 1913.
- [41] K. J. Hughes, T. Turanyi, Clague; A. R., and Pilling M. J. Development and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane. *International Journal of Chemical Kinetics*, 33 :513–538, 2001.

-
- [42] D.J. Hwang, J.W. Choi, J. Park, S.I. Kell, C.B. Ch, and D.S. Noh. Numerical study on flame structure and soot formation in $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-N}_2$ counterflow diffusion flame diluted with H_2O . *International Journal of Energy Research*, 28 :1255–1267, 2004.
- [43] S. Ishizuka and C. K. Law. An experimental study of extinction and stability of stretched premixed flames. In *19th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 327–335. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1982.
- [44] R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke, and J. A. Miller. Premix : A fortran program for modeling steady laminar one-dimensional flames. Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.
- [45] M.S. Klassen, D.D. Thomsen, J.R. Reisel, and N.M. Laurendeau. Laser-induced fluorescence measurements of nitric oxide formation in high-pressure premixed methane flames. *Combust. Sci. Tech.*, 110 :229–247, 1995.
- [46] A. A. Konnov. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>.
- [47] P. Laffitte. *La propagation des flammes dans les melanges gazeux*. Hermann et Cie, Actualites scientifiques et industrielles, PARIS, 1939.
- [48] C. K. Law. Dynamics of stretched flames. In *22nd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1381–1402. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988.
- [49] C. K. Law, S. Ishizuka, and M. Mizomoto. Lean limit extinction of propane/air mixtures in the stagnation point flow. In *18th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1791–1798, Waterloo, Canada, 1981. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [50] C. K. Law and C. J. Sung. Structure, aerodynamics and geometry of premixed flamelets. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 26 :459–505, 2000.
- [51] C. K. Law, D. L. Zhu, and G. Yu. Propagation and extinction of stretched premixed flames. In *21st Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1419–1426. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986.
- [52] H. LeChatelier. *Lecons sur le carbone, la combustion, les lois chimiques*. Hermann, 1907.
- [53] B. Lewis and G. Von Elbe. *Combustion, Flames and Explosions of Gases*. Academic Press, New York, third edition, 1987.
- [54] P. Libby and F. Williams. Premixed flames with general rates of strain. *Combust. Sci. and Tech.*, 54 :237, 1987.
- [55] A. Lif and K. Holmberg. Water-in-diesel emulsions and related systems. *Advances in Colloid and Interface Science*, 123-126 :231–239, 2006.
- [56] C.Y. Lin and K.H. Wang. Diesel engine performance and emission characteristics using three-phase emulsions as fuel. *Fuel*, 83 :537 – 545, 2004.

- [57] E. Mallard and H. Le Chatelier. Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les mélanges explosifs. *Comptes rendus de l'Academie des Sciences, Paris*, 93 :145, 1881.
- [58] E. Mallard and H. Le Chatelier. *Ann. Min.*, 4 :274, 1883.
- [59] N.R. Marchionna, L.A. Diehl, and A.M Trout. Effect of inlet-air humidity, temperature, pressure and reference mach number on the formation of oxides of nitrogen in a gas turbine combustor. Technical Report TN D-7396, National Aeronautics and Space Administration, October 1973.
- [60] A. Mazas, D. Lacoste, B. Fiorina, and T. Schuller¹. Effects of water vapor addition on the laminar burning velocity of methane oxygen-enhanced flames at atmospheric pressure. In *European Combustion Meeting*, 2009.
- [61] R.D. Mehta and P. Bradshaw. Design rules for small low speed wind tunnels. *Aeronaut. J.*, pages 443–449, 1979.
- [62] J. A. Miller and C. T. Bowman. Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 15 :287–338, 1989.
- [63] J. Natarajan, T. Lieuwen, and J. Seitzman. Laminar flame speeds of h₂/co mixtures : Effect of co₂ dilution, preheat temperature, and pressure. *Combust. Flame*, 151(1-2) :104–119, 2007.
- [64] N. Noiray, D. Durox, T. Schuller, and S. Candel. Passive control of combustion instabilities involving premixed flames anchored on perforated plates. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :1283–1290, 2007.
- [65] Y Ogami and H. Kobayashi. Laminar burning velocity of stoichiometric ch₄/air premixed flames at high-pressure and high-temperature. *JSME International Journal*, 48 :603–609, 2005.
- [66] H. Özcan and M.S. Söylemez. Experimental investigation of the effects of water addition on the exhaust emissions of a naturally aspirated, liquefied-petroleum-gas-fueled engine. *Energy & Fuels*, 19 :1468–1472, 2005.
- [67] J. Park, S Kim, S. Keel, D. Noh, C Oh, and D. Chung. Effect of steam addition on flame structure and no formation in h₂-o₂-n₂ diffusion flame. *International Journal of Energy Research*, 28 :1075–1088, 2004.
- [68] J. Park, S.G Kim, K.M. Lee, and T.K. Kim. Chemical effect of diluents on flame structure and no emission characteristic in methane-air counterflow diffusion flame. *International Journal of Energy Research*, 26 :1141–1160, 2002.
- [69] B.D. Peters and R.F. Stebar. Water-gasoline fuels - their effect on spark ignition engine emissions and performance. Technical Report 760547, SAE, 1976.
- [70] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2000.

-
- [71] T. Poinso. Comments on 'flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen air flames at normal temperature and pressure' by aung et al. *Combust. Flame*, 113 :279–284, 1998.
- [72] T. Poinso, T. Echekki, and M. G. Mungal. A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combust. Sci. Tech.*, 81(1-3) :45–73, 1992.
- [73] T. Poinso, D. Haworth, and G. Bruneaux. Direct simulation and modelling of flame-wall interaction for premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 95(1/2) :118–133, 1993.
- [74] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition., 2005.
- [75] B. Renou, A. Mura, E. Samson, and A. Boukhalfa. Characterization of the local flame structure and the flame surface density for freely-propagating premixed flames at various lewis numbers. *Combust. Sci. Tech.*, 174(4) :143–179, 2002.
- [76] P. L. Rijke. Notice of a new method of causing a vibration of the air contained in a tube open at both ends. *Phil. Mag.*, 17 :419–422, 1859.
- [77] P. Schon, G. Comte-Bellot, and G. Charnay. Anémomètres à fil ou à film chaud. *Techniques de l'ingénieur*, 1994.
- [78] T. Schuller, D. Durox, and S. Candel. Self-induced combustion oscillations of laminar premixed flames stabilized on annular burners. *Combust. Flame*, 135 :525–537, 2003.
- [79] G. Searby and J. Quinard. Direct and indirect measurements of markstein numbers of premixed flames. *Combust. Flame*, 82 :298–311, 1990.
- [80] G. Searby and D. Rochwerger. A parametric acoustic instability in premixed flames. *J. Fluid Mech.*, 231 :529–543, 1991.
- [81] K. Seshadri, N. Peters, and F. A. Williams. Asymptotic analyses of stoichiometric and lean hydrogen-air flames. *Combust. Flame*, 96(4) :407–427, 1994.
- [82] G. I. Sivashinsky. Diffusional-thermal theory of cellular flames. *Combust. Sci. Tech.*, 15 :137–146, 1977.
- [83] M. D. Smooke, K. Seshadri, and I. K. Puri. The structure and extinction of partially premixed flames burning methane in air. In *22nd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1555–1563. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988.
- [84] Softpredict. *Chemical Equilibrium : Basics of and techniques for computing chemical equilibria*, 2006.
- [85] Softpredict. *1-D and counterflow flames - including burner-stabilized & freely propagating flames*, 2007.
- [86] C. H. Sohn, I. M. Jeong, and S. H. Chung. Numerical study of the effects of pressure and air-dilution on no formation in laminar counterflow diffusion flames of methane in high temperature air. *Combustion and Flame*, 130(1-2) :83 – 93, 2002.

- [87] V. Subramanian, Mallikarjuna J.M., and A. Ramesh. Effect of water injection and spark timing on the nitric oxide emission and combustion parameters of a hydrogen fuelled spark ignition engine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 :1159–1173, 2007.
- [88] D.D Thomsen, F.F. Kuligowski, and N.M. Laurendeau. Modeling of no formation in premixed, high-pressure methane flames. *Combust. Flame*, 119 :307–318, 1999.
- [89] K.C. Tsao, C.L. Wang, and E.M. Miller. Performance of gasoline-water fuel in a modified si engine. Technical Report 841399, SAE, 1984.
- [90] L. Ubbelohde and M. Hofsass. *J. Gasbeleucht*, 56(1225 and 1253), 1913.
- [91] L. Ubbelohde and E. Koelliker. *J. Gasbeleucht*, 59(49, 65, 82 and 98), 1919.
- [92] C. M. Vagelopoulos and F. Egolfopoulos. Direct experimental determination of laminar flame speeds. In *27th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 513–519. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [93] A. Van Maaren, D. S. Thung, and L. R. H. De Goey. Measurement of flame temperature and adiabatic burning velocity of methane/air mixtures. *Combust. Sci. Tech.*, 96 :327, 1994.
- [94] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 28 :193 – 266, 2002.
- [95] R. V. Wheeler. *J. Chem. Soc.*, 113 :840, 1918.
- [96] R. V. Wheeler. *J. Chem. Soc.*, 115 :81, 1919.
- [97] F. A. Williams. *Combustion theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.
- [98] Y. B. Zeldovich and D. A. Frank-Kamenetskii. *Selected works of Ya. B. Zeldovich, Chemical Physics and Hydrodynamics*,. Princeton University Press, 1962.
- [99] Ya. B. Zeldovitch, G. I. Barenblatt, V. B. Librovitch, and G. M. Makhviladze. *Mathematical Theory of Combustion and Explosion*. Nauka, Moscow, 1980.
- [100] D. Zhao, H. Yamashita, K. Kitagawa, N. Arai, and T. Furuhashi. Behavior and effect on nox formation of oh radical in methane-air diffusion flame with steam addition. *Combust. Flame*, 130 :352–360, 2002.

Annexe A

Article

"Experimental and numerical study of the accuracy of flame speed measurements in a Bunsen burner"

Auteur : Y. Dhué, T. Boushaki, L. Selle, B. Ferret and T. Poinsot

Présenté au 6^{ième} Symposium de Combustion Méditerranéen (Juin 2009) (www.ichmt.org/mcs-09)

EXPERIMENTAL AND NUMERICAL STUDY OF THE ACCURACY OF FLAME SPEED MEASUREMENTS IN A BUNSEN BURNER

Y. Dhué, T. Boushaki, L. Selle, B. Ferret and T. Poinso

Corresponding author: poinso@imft.fr

Université de Toulouse

IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse)

Allée C. Soula, F-31400 Toulouse, France

Abstract

Despite their importance for turbulent combustion, premixed laminar flame speeds are still a weak part of CFD models: they remain difficult to measure and multiple techniques are still being tested and developed to measure them accurately. This paper studies sources of uncertainties in the measurement of laminar flame speeds using the Bunsen burner technique. To evaluate these uncertainties a two-dimensional slot burner is operated both experimentally and numerically. Sources of potential mismatch between the flame speed measured in the Bunsen setup using the classical flame surface method and the true laminar flame unstretched flame speed are studied and quantified. Curvature at the flame tip, strain on the flame sides and local quenching at the flame base can modify the local flame speed and require corrections: they are studied using a two-dimensional DNS code and shown to be small (of the order of 1 percent). DNS also provides strain, curvature, stretch, displacement and consumption flame speed along the flame front, confirming that stretch remains small and that the local consumption speed remains very close to the unstretched premixed flame speed, thereby validating the principle of the method. A second correction is required by the finite aspect ratio of the slot used to inject the premixed gases (10 in this case) which induces a flow acceleration in the measurement region. This correction can be evaluated from velocity measurement in the slot section and found to be of the order of 5 percent. Corrections are then applied to a methane - air flame Bunsen burner and results are compared to experimental results found in the literature and to a one-dimensional premixed flame code (COSILAB) using the GRIMECH 3 scheme.

Introduction

In most CFD models for turbulent combustion systems [4, 24, 41, 26], the laminar premixed flame speed is an essential ingredient, either to validate the chemical scheme used in the source terms (in pdf methods [27] for example) or to provide the speed of the flamelets (in the G equation formulation [24] or in the Coherent Flame model [28] for example). Measuring or calculating laminar flame speeds [22, 19, 39, 10] however remains a difficult challenge. Multiple methods can be used to measure laminar flame speeds: (1) the propagating flame in a tube, (2) the stagnation point flame, (3) the spherical unsteady flame and (4) the Bunsen burner.

For all methods, it is possible to use either an experiment or a simulation. Method 1 seems to be the simplest one: measuring the position versus time of a laminar flame propagating in a tube gives a flame speed [21, 43, 23]. However, producing such flames in the absence of any instability or wall effects is difficult [32, 6] and this method which works well for detonation is not often used for deflagrations. Method 2 uses a stagnation point flow configuration [20, 13, 17] where the flame is stabilized in a counter flow and velocity measurements are used to deduce the displacement speed of the front relative to the flow. In this configuration which can be used experimentally or numerically, the difficulty is that the flow velocity is strongly varying and that measuring flame speeds requires sophisticated interpolation methods. In Method 3 a spherical

deflagration is created by igniting a premixed stagnant flow and measuring the pressure versus time [23, 42, 11] or in more recent techniques, the position of the flame front versus time. This absolute flame speed must be corrected by the density ratio of burnt to fresh gases to provide the laminar flame speed. This technique is commonly used, works at high pressures [1, 16] but its precision is the source of multiple controversies [9, 25] because the spherical front is continuously submitted to a varying stretch [34, 5, 44].

Method 4 (the Bunsen burner) is the topic of this paper and has been used for more than a century [19]. In this method a simple measurement of the height or of the surface of a flame stabilized over an orifice is sufficient to evaluate the flame speed. Like all other methods, the Bunsen technique faces multiple difficulties and uncertainties which are discussed here. To evaluate the precision of the Bunsen burner configuration to measure flame speeds, three techniques will be compared to measure the speed of a simple laminar premixed flame:

- an experimental measurement in the Bunsen burner set-up (using various methods to evaluate the flame area),
- a numerical calculation in a one-dimensional configuration using COSILAB and a full scheme for methane (GRI-Mech [12]) which gives a flame speed called $s_L^0(GRI)$ and
- a two-dimensional calculation of the exact experimental set-up using a Direct Numerical Simulation (DNS) code [18, 36] and a simplified two-step chemical scheme (called 2SCM2) used in previous LES [31]. The same code is also used to compute the laminar flame speed $s_L^0(2SCM2)$ for a one-dimensional flame with 2SCM2 to be used as a reference for two-dimensional cases.

Using these three methods together allows to quantify the systematic errors associated with the measurement of a flame speed using the surface of a flame stabilized on a two-dimensional slot. The next section presents the experimental set up before describing the method and the potential sources of errors associated with it. The numerical tools, 1D code for flames (COSILAB) and two-dimensional DNS code, are then presented. Finally, results are described first by evaluating systematic measurement errors in the DNS code and then by comparing the experimental results with the COSILAB data. All tests are performed for a methane / air flame at atmospheric pressure (1 bar) and standard temperature (300 K) over a range of equivalence ratio ϕ going from 0.8 to 1.2.

Experimental set up

The experiment used to measure the flame speed of a CH_4 -air mixture at IMFT is displayed in Fig. 1. Flow rates are controlled and measured using Bronkhorst flow meters. The temperature is regulated to ensure a constant value in the plenum. Air is injected tangentially in the plenum where it mixes with methane jets. The flow is then laminarized by an array of small balls, a honeycomb section and a converging nozzle. The slot used to stabilize the flame is $h = 10$ mm wide and $L = 100$ mm long. The slot is water cooled and its surface temperature was measured around 350 K.

A typical image of the flame obtained for a bulk velocity U_b of 1.7 m/s and an equivalence ratio ϕ of 0.8 is given in Fig. 2. This image is used to evaluate the flame length L_f using two methods. In the first one (TRIANG), the flame is supposed to be a perfect triangle and its length L_f is evaluated as $L_f^1 = 2x$ where x is the triangle side length. In the second method (IMAGE), the line corresponding to the maximum reaction rate is extracted from the flame image (Fig. 2) and its length L_f^2 is measured using image analysis. In both methods, the measurement of the flame length L_f is done in the mid-section of the slot where side effects can be neglected and the flame can be assumed to be two-dimensional.

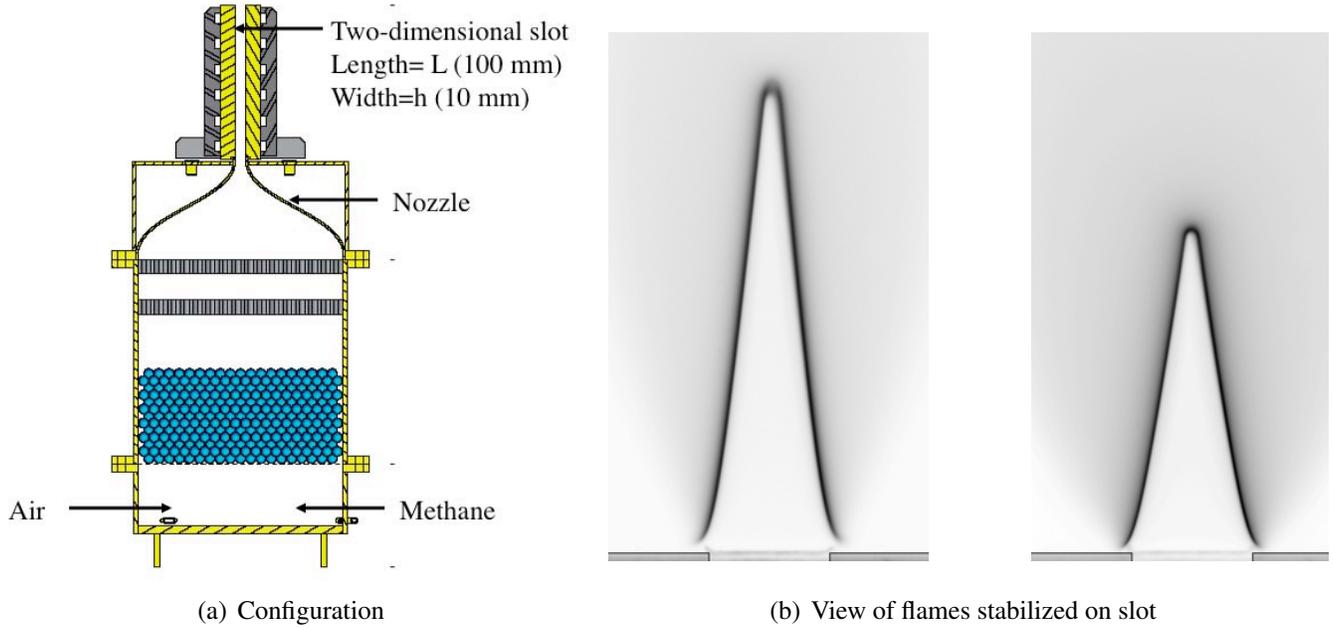


Figure 1: A quasi two-dimensional Bunsen burner for methane / air flames: (a) configuration, (b) flame positions for $\phi = 0.8$ (left) and 1.0 (right) obtained experimentally.

Principle of method and analysis of systematic errors

The Bunsen burner was one of the first methods used to measure consumption flame speeds [37, 38, 8] and experimentalists found out rather soon that the method could lead to significant error bars. The principle of the method (Fig. 1) is to mix air and fuel and inject them through an orifice (usually a two-dimensional slot). Writing the conservation of the volume flux between the orifice (width h , bulk velocity U_b) and the flame surface (length L_f) leads to a simple expression for the mean consumption speed \bar{s}_L averaged along the flame surface:

$$\bar{s}_L = Uh/L_f \quad (1)$$

where L_f is either L_f^1 (TRIANG) or L_f^2 (IMAGE). This equation is exact but it does not mean that \bar{s}_L is an exact measurement of the unstretched laminar flame speed s_L^0 at the same pressure, temperature and equivalence ratio: the flame front in the Bunsen configuration is, in many places, very different from an unstretched flame so that its average flame speed \bar{s}_L may differ from s_L^0 . The phenomena which can induce local effects and lead to \bar{s}_L which differ from s_L^0 are (a) the quenched region at the flame base near the lips of the slot, (b) strain effects on the flame side which modify locally the flame speed and (c) flame curvature at the flame tip. All these factors can affect the local flame speed and induce a deviation of the averaged speed \bar{s}_L compared to the laminar unstrained adiabatic flame speed s_L^0 . Of course, the measurement of the flame length L_f can also be affected by uncertainties and great care was used to identify the isoline of the images which tracks the reaction rate zone. In a first step, however, we will concentrate on the systematic errors (a) to (c) and see if these errors are significant and must be accounted for in the method.

Our objective is to see whether Eq. (1) can be corrected to use \bar{s}_L as a measure of s_L^0 . To do this, we will evaluate the ratio s_L^0/\bar{s}_L and see how it must be corrected. The sources for the correction factors are the systematic errors (a) to (c) which will be measured in the two-dimensional DNS code and introduced as a factor η_1 and the three-dimensional effects which will be quantified through a factor η_2 so that the ratio s_L^0/\bar{s}_L will be $\eta_1\eta_2$.

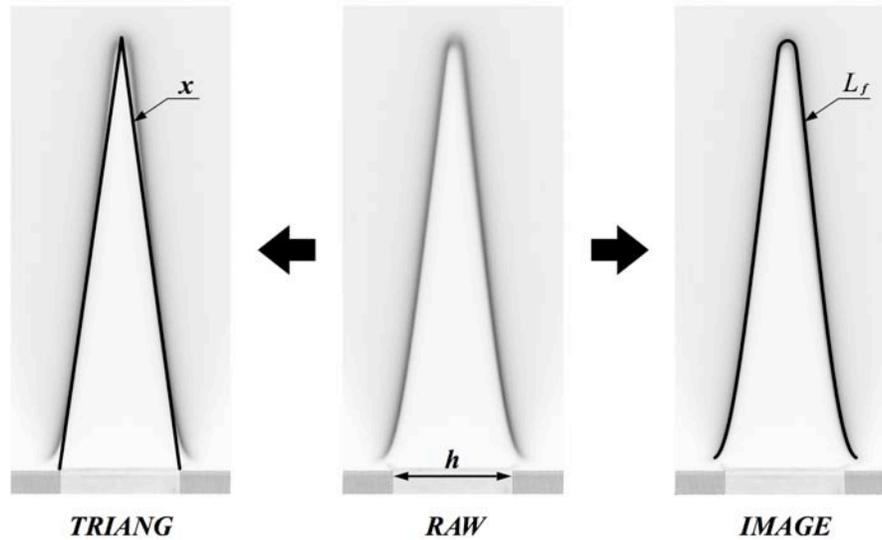


Figure 2: Flame image. Center: raw image. Left: TRIANG method (a triangle is fitted on the flame: $L_f = 2x$). Right: image processing is used to measure the flame length L_f .

Numerical tools

Two codes will be used for this study:

- a laminar flame code (COSILAB) which provides the flame speed for any chemical scheme. Here the GRIMECH 3 scheme [12] will be used for CH_4 -air flames,
- a two-dimensional DNS code which is used to compute the full Bunsen burner configuration of Fig. 1. Using GRIMECH in such a code is possible today [33, 30, 2] but would be expensive and is not needed: a two-step scheme (2SCM2) for methane [31] is sufficient to investigate the flame structure in the Bunsen flame.

Table 1: Rate constants for the 2SCM2 scheme used in the two-dimensional DNS code: the activation energies are in cal/moles and the preexponential constants in cgs units.

A_1	$n_1^{CH_4}$	$n_1^{O_2}$	E_{a1}	A_2	n_2^{CO}	$n_2^{O_2}$	$n_2^{CO_2}$	E_{a2}
$2E15$	0.9	1.1	34500	$2E9$	1	0.5	1	12000

Using both tools together brings new insight into the flame structure. COSILAB is useful to provide the most precise estimate of the premixed laminar flame speed s_L^0 using the most recent chemical scheme (GRIMECH) but cannot be used simply in a multidimensional configuration. The DNS code on the other hand, can compute the exact geometry of the experiment using unstructured meshes. DNS captures the quenched zone near the lips of the slot where temperature is imposed. It also includes strain and curvature effects present in the real configuration. For the DNS the rate coefficients are given in Table 1 and the transport coefficients are summarized in Table 2.

Table 2: Schmidt numbers used in the two-dimensional DNS code.

CH_4	CO_2	CO	O_2	H_2O	N_2
0.68	0.98	0.76	0.76	0.6	0.75

Effects of stretch and heat losses using DNS (η_1)

In a first step, the DNS was run alone for $\phi = 0.8$ and $\phi = 1$. For these cases, the flame speeds obtained in a one-dimensional configuration using the DNS code and the same mesh size are $s_L^0(2SCM2) = 0.27$ m/s and 0.372 m/s. The DNS results for the stoichiometric flame are displayed on Fig. 3 which also shows a view of the whole computational domain and the unstructured mesh. The unstructured grid starts in the plenum feeding the slot and ends in the atmosphere, far from the flame zone to avoid effects of boundary conditions.

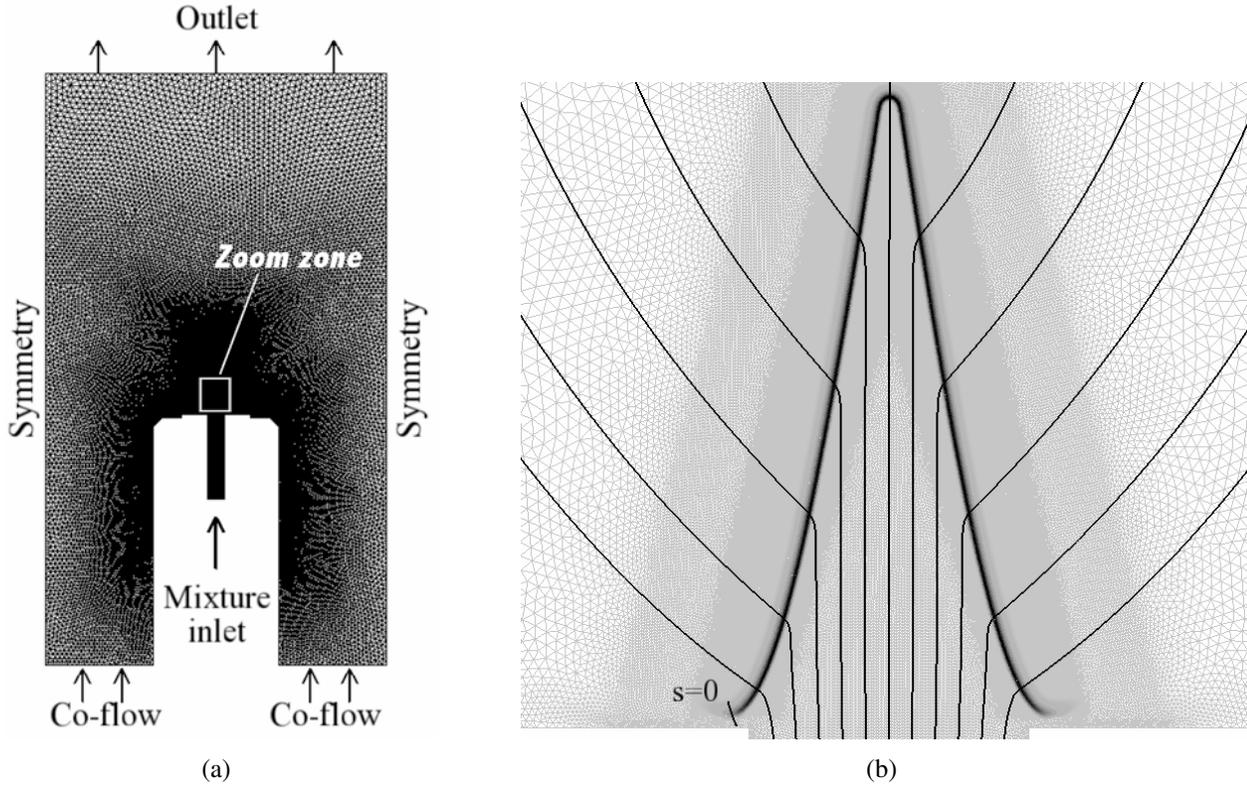


Figure 3: (a): total computational domain and mesh. (b): zoom on white rectangle in image (a) on flame: streamlines, mesh (triangles) and reaction rate field (gray levels).

Table 3: Summary of flame speed values obtained by post processing DNS fields and comparison with the unstretched laminar flame speed $s_L^0(2SCM2)$. The same chemical scheme is used for all computations.

Case	$s_L^0(2SCM2)$	\bar{s}_L (TRIANG)	η_1 (TRIANG)	\bar{s}_L (IMAGE)	η_1 (IMAGE)
$\phi = 0.8$	0.27	0.266	1.016	0.2697	1.0014
$\phi = 1$	0.372	0.368	1.011	0.3695	1.0071

The flame position can be isolated from the DNS data by tracking its position and various statistics can be gathered as a function of the flame abscissa. The simplest analysis consists in applying to the DNS data, the same methods as in the experiment (TRIANG and IMAGE). To do this, a fuel mass fraction isoline is used to identify the flame front: $Y_f = 0.007$ for $\phi = 0.8$ and 0.012 for $\phi = 1$. This line corresponds almost exactly to the location of maximum reaction rate in both cases. For the IMAGE method, the flame length is defined as the length of the mass fraction isolevel where the reaction rate is larger than half its maximum value: this criterion was devised to exclude the flame base region where the flame is quenched. Table 3

summarizes the flame speeds measured using both methods TRIANG and IMAGE (Fig. 2) and compares them to $s_L^0(2SCM2)$ for an equivalence ratio of 0.8 and 1. The ratio between $s_L^0(2SCM2)$ and \bar{s}_L ($\eta_1 = s_L^0(2SCM2)/\bar{s}_L$) is always larger than unity showing that the average flame speed underestimates the true laminar flame speed. However, η_1 is always close to unity and errors are smaller than 1.5 percent for both TRIAN and IMAGE methods, showing that the Bunsen technique is very accurate in these circumstances. A correction factor η_1 of 1.01 will be retained for the TRIANG method and 1.005 for the IMAGE method.

The previous DNS result provides a useful global information to correct measurements but DNS data can also be used to analyse the local flame structure and verify for example the variations of the flame speed and structure along the flame front abscissa s , from the flame base ($s = 0$) to the flame tip ($s = L_f/2$ see Fig.2). Important quantities for laminar premixed flames are:

- The displacement speed $s_d = (\vec{w} - \vec{u}) \cdot \vec{n}$ where \vec{w} is the absolute velocity of the flame front (zero in this case), \vec{u} is the flow speed and \vec{n} is the flame normal. The local displacement speed is not a direct measure of the laminar flame speed. A commonly used estimation of the local flame speed using s_d is [26]: $s_c^{from s_d} = s_d T/T_0$ where T is the local flame temperature and T_0 the fresh gas temperature.
- The true consumption speed s_c which is given by $s_c = (\int \dot{\omega}_F dn)/\rho_0 Y_F^0$ where $\dot{\omega}_F$ is the fuel reaction rate, ρ_0 is the fresh gas density and Y_F^0 is the fuel mass fraction in the fresh gases. The integral over $\dot{\omega}_F$ is performed along the local flame normal \vec{n} .
- The flame strain term which is the velocity gradient in the flame plane: du_t/dt where t is the coordinate in the tangent plane of the flame and u_t the tangent velocity in the same plane.
- The flame curvature \mathcal{R} which can be obtained from the derivative of the temperature field for example: $\mathcal{R} = \nabla \cdot T / |\nabla \cdot T|$.
- The flame stretch κ which is the main parameter controlling the flame structure [44]: $\kappa = \partial u_t / \partial t + s_d / \mathcal{R}$

All these quantities have been measured on the flame computed by DNS of Fig. 3. Fig. 4 displays plots of strain, curvature and stretch along the flame abscissa. All terms are normalized by the inverse characteristic flame time s_L^0/δ_L^0 : significant effects are expected only when these reduced values (similar to Karlovitz numbers) reach values close to unity. Note that the flame is stretched on its sides (positive stretch) but compressed at its tip (stretch is negative) as expected. Fig. 4a shows that the overall stretch is very small everywhere along this flame. Effects of strain or curvature are very limited and the flame behaves as if it was unstretched. At the flame tip, the stretch becomes very negative leading to Karlovitz numbers of the order of -10 but over a very limited region.

Fig. 4b displays the two consumption speeds which can be extracted from the DNS: s_c and $s_c^{from s_d}$. The effect of heat loss at the flame base can be observed for small values of the flame abscissa, at the flame base: the consumption speed s_c is lower at flame base ($s = 0$) but goes up to s_L^0 rapidly downstream. s_c is then almost constant, explaining why the averaged value of the flame speed is close to s_L^0 . Strong changes in consumption speeds are observed only at the flame tip ($s/\delta_L^0 = 60$) where the compressed front leads to a higher freaction rate. Finally, note that even though s_c and $s_c^{from s_d}$ are close in the unstretched region, they differ in the quenched zone (at the flame base) and in the curved zone (at the flame tip) showing that the approximation used for $s_c^{from s_d}$ is valid only for simple flames and should not be used in more complicated situations.

Evaluation of three-dimensional corrections (η_2)

Another error factor comes from the fact that the flow issuing from the slot is not perfectly two-dimensional. At the two extremities of the slot (Fig. 5), the velocity goes to zero so that

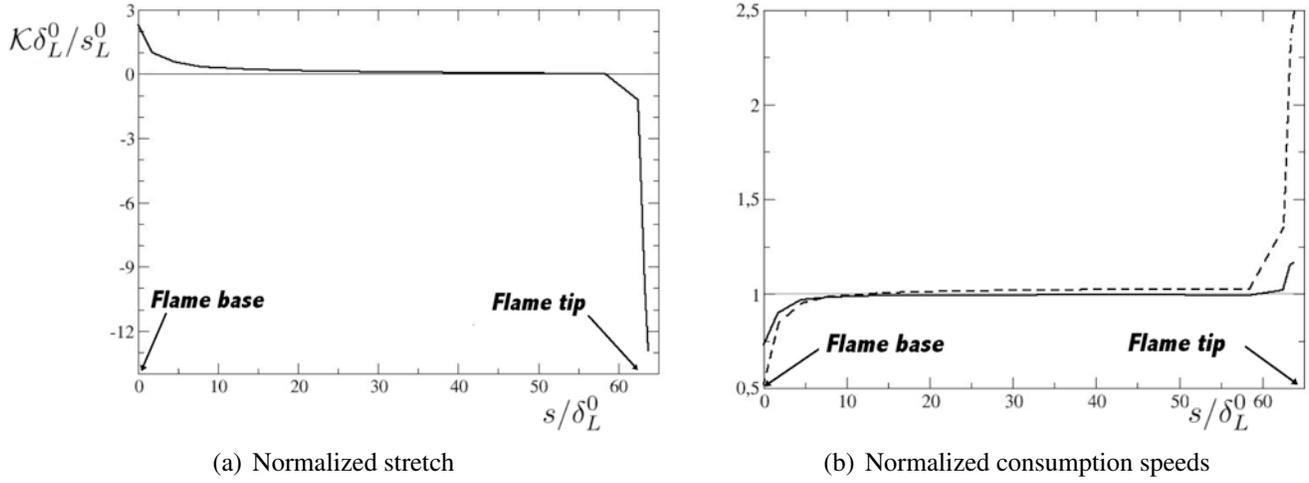


Figure 4: DNS results. Left: stretch (scaled by inverse characteristic flame time s_L^0/δ_L^0) vs flame abscissa (scaled by flame thickness δ_L^0). Right: consumption speed s_c (solid line) and speed obtained from the displacement speed $s_c^{from s_d} = s_d T/T_0$ (dashed line) vs normalized flame abscissa. Speeds normalized by the laminar flame speed $s_L^0(2SCM2)$.

the flow has to accelerate in the center of the channel. This increased velocity makes the flame longer in the mid-section of the slot, where the flame length is measured and leads to a systematic bias in the evaluation of the flame speed by Eq. (1).

If we suppose that the flow is established at the duct outlet (ie that the feeding duct is infinitely long), this bias induces a correction factor η_2 which can be estimated analytically using for example the results of Tatsumi and Yoshimura [35] who computed the established velocity profile for a laminar flow in a rectangular duct (which is a good approximation for the present case). These authors solved the Poisson equation for the axial velocity field in a rectangular duct using Legendre polynomials. They show that transverse velocity profiles ($u(x, y)$ at fixed y) remain parabolic and they provide a simple fit linking the maximum velocity in the channel ($u(x=0, y=50)$) as a function of the bulk velocity U_b and the aspect ratio α of the duct: $U_b/u(x=0, y=50) = 2/3 - 0.42/\alpha$. From this relation, the η_2 factor can be easily obtained:

$$\eta_2^{ana} = 1/(1 - 0.63/\alpha) \quad (2)$$

Here, the aspect ratio α is 10 so that η_2^{ana} is 1.067.

To verify this evaluation of η_2 , Pitot tube measurements were also performed on the experiment to evaluate the axial velocity along two lines: $y = 50$ and $x = 0$ (Fig. 5).

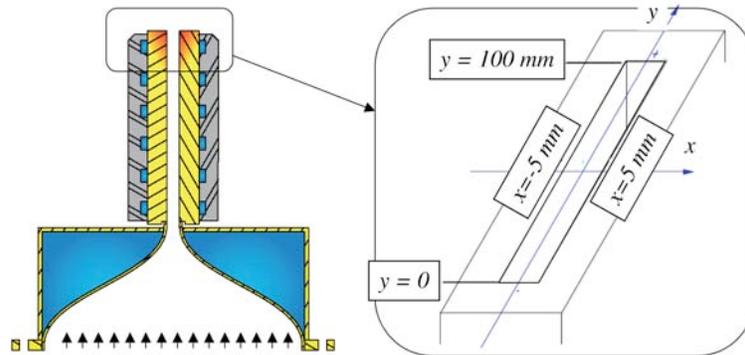


Figure 5: Left: view of nozzle and exit section. Right: Cuts location for velocity measurements.

As expected, two boundary layers are observed at the extremities of the slot (Fig. 6b) but the axial velocity profile in the transverse direction (Fig. 6a) is not perfectly parabolic, indicating

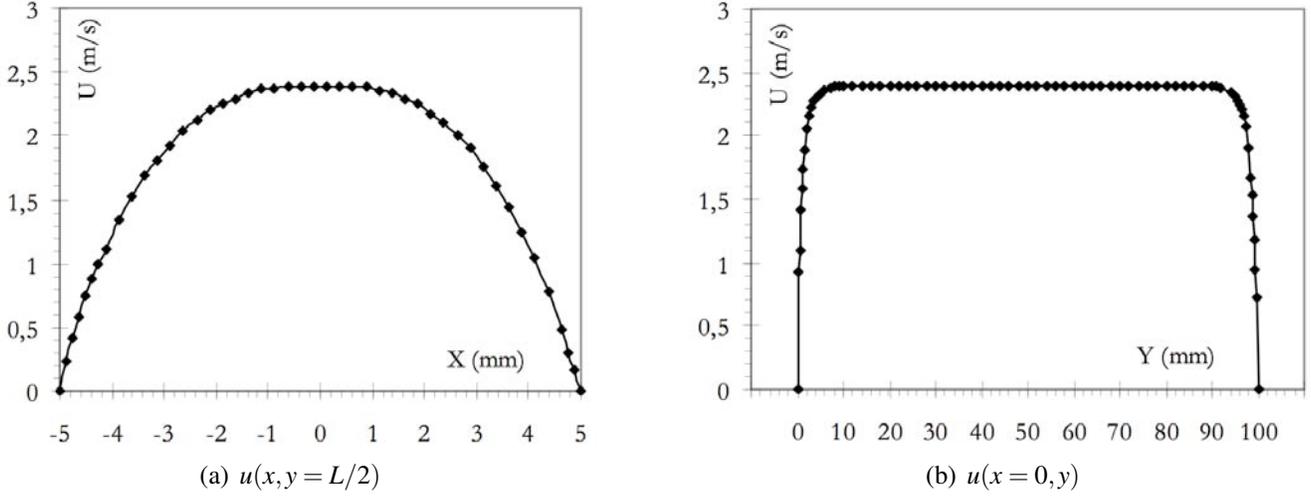


Figure 6: Axial velocity profiles along the transverse (a) and longitudinal directions (b).

that the flow is not fully established. The correction factor η_2 can be evaluated using the velocity measurements of Fig. 6b. For a very long slot (i.e. large A), the velocity profile at the center of the slot ($y = L/2$) is given by the Poiseuille solution:

$$u^{Poi}(x) = \frac{3}{2}U_b\left(1 - \left(\frac{x}{l}\right)^2\right) \quad (3)$$

For a finite A slot like in the present experiment, the Pitot tube measurements provide the axial velocity profile (Fig. 6a) and the correction factor η_2 is simply expressed as

$$\eta_2^{exp} = \frac{\int_{-h/2}^{h/2} u(x, y = L/2) dx}{\int_{-h/2}^{h/2} u^{Poi}(x) dx} \quad (4)$$

where L is the outlet slot length (100 mm). This evaluation leads to $\eta_2^{exp} = 1.054$. This value is close to the value obtained analytically (Eq. 2) assuming that the feeding channel is infinitely long ($\eta_2^{ana} = 1.067$) so that the experimental value $\eta_2 = 1.054$ was kept for η_2 .

Application to methane / air flames

The two previous sections can be summarized as follows: in the slot burner of Fig. 1, the unstretched laminar flame speed s_L^0 can be obtained from the averaged flame speed \bar{s}_L in a transverse plane by correcting it by two factors η_1 and η_2 : η_1 integrates the effect of quenching at the flame base, strain and curvature effects. It is a small correction, estimated from a two-dimensional DNS as $\eta_1 = 1.01$ for method TRIANG and 1.005 for method IMAGE. η_2 is due to side effects at each extremity of the slot which lead to a flow acceleration in the slot center where the flame shape is visualized and used to measure \bar{s}_L . This factor depends on the aspect ratio of the rectangular duct and is of the order of $\eta_2 = 1.054$ for the present channel.

The final result $s_L^0 = \eta_1 \eta_2 \bar{s}_L$ is now used to post process experimental results for a methane / air flame at atmospheric pressure and temperature ($T_0 = 300$ K). The method used to measure the flame length is method IMAGE but method TRIANG lead to almost identical values. Flame speed (s_L^0) results are compared over a range of equivalence ratios with various other results: the numerical output of COSILAB in the same conditions is used as a reference but other experimental values are also introduced for comparison [40, 39, 14, 29, 3, 7]. Fig. 7 displays flame speed values from $\phi = 0.8$ to 1.2. The only numerical result in Fig. 7 is the COSILAB data obtained with GRI Mech 3. Measurements were performed in the Bunsen setup using an outlet

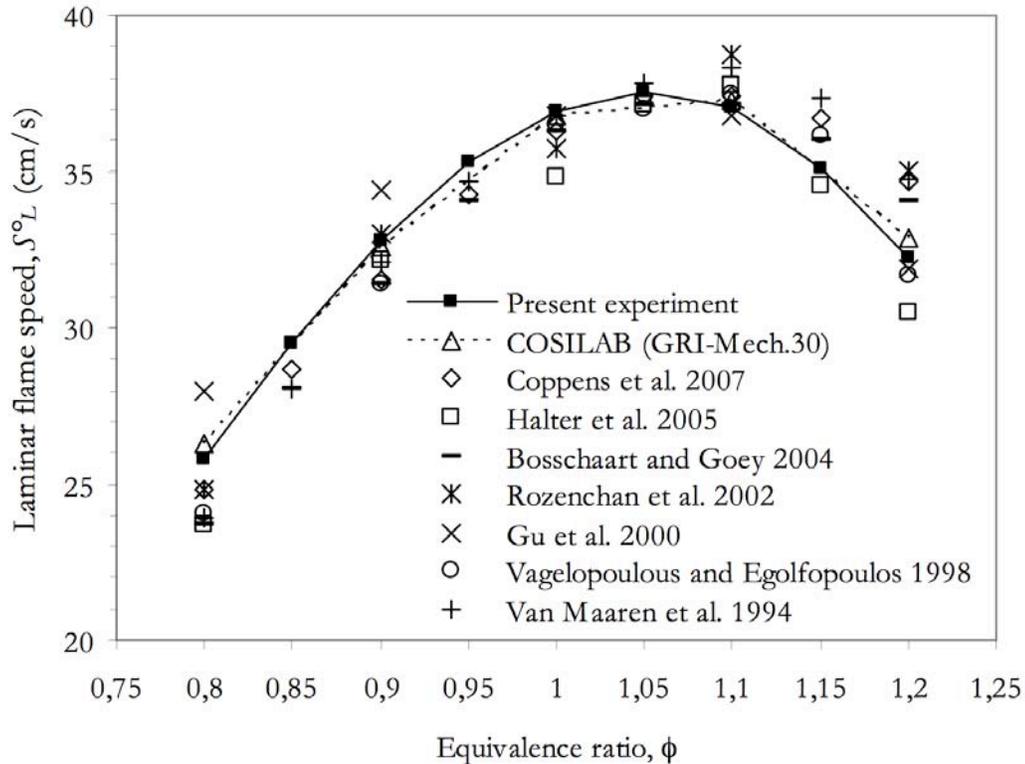


Figure 7: Laminar flame speed s_L^0 versus equivalence ratio ϕ at 300 K and 1 bar. Present numerical simulations: dotted line. Present measurements: solid line.

bulk velocity $U_b = 1.9$ m/s. The effect of this velocity was verified by changing U_b from 1.2 to 1.9 m/s: such changes lead to variations in s_L^0 smaller than 0.3 percent. The present measurements agree well with COSILAB results. They are slightly higher than other experiments for lean flames (except for the data of Gu [14]) and slightly below them for rich flames (except for the data of Halter et al [15]). Considering the error bars on all flame speed measurements (see for example a summary of measured values for methane / air flames in [3]), it is difficult to determine which method is the best but the present one obviously gives reasonable results and matches GRI MECH 3 results very well.

Conclusion

Sources of errors in the measurement of laminar flame speeds using a two-dimensional Bunsen burner setup have been evaluated using a combination of experimental and numerical (1D and 2D DNS) tools for a methane / air flame. Results show that the corrections due to quenching at the flame base, strain on the flame sides and curvature at the tip are almost negligible (of the order of 1 percent). The finite aspect ratio of the slot ($\alpha = 10$) used to stabilize the flame has a stronger effect: it leads to flow acceleration in the mid part of the slot and a correction of 5.4 percent for the present configuration. Using these corrections, the methane / air flame speed measured in the experiment matches the value computed by COSILAB and the GRIMECH scheme as well as most other experimental data for equivalence ratios going from 0.8 to 1.2.

References

- [1] K. T. Aung, M. I. Hassan, and G. M. Faeth. Effects of pressure and nitrogen dilution on flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen air flames. *Combust. Flame*, 112

- (1):1–15, 1998.
- [2] J.B. Bell, M.S. Day, J.F. Grcar, M.J. Lijewskia, J. F. Driscoll, and S.A. Filatyev. Numerical simulation of a laboratory-scale turbulent slot flame. *Proc. Combust. Inst.* , 31:1299–1307, 2007.
- [3] K.J. Bosschaart and L.P.H. de Goey. The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method. *Combust. Flame* , (136):261–269, 2004.
- [4] K. N. C. Bray, M. Champion, and P. A. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In R. Borghi and S.N.B. Murthy, editors, *Turbulent Reactive Flows*, volume 40, pages 541–563. Lecture notes in engineering, Springer Verlag, 1989.
- [5] S. M. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame surface area. *Combust. Sci. Tech.* , 70:1–15, 1990.
- [6] P. Clavin. Dynamics of combustion fronts in premixed gases: from flames to detonations. *Proc. Combust. Inst.* , 28:569–586, 2000.
- [7] F.H.V. Coppens, J. De Ruyck, and A.A. Konnov. Effects of hydrogen enrichment on adiabatic burning velocity and no formation in methane + air flames. *Experimental Thermal and Fluid Science*, (31):437–444, 2007.
- [8] J. Corsiglia. *American Gas Association Monthly*, 13(437), 1931.
- [9] D. R. Dowdy, D. B. Smith, and S. C. Taylor. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 325–332. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [10] F. Egolfopoulos and C. K. Law. Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin flame technique. In *25th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1341–1347. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994.
- [11] O.C. Ellis and R. V. Wheeler. *J. Chem. Soc.*, 153, 1927.
- [12] M. Frenklach, H. Wang, M. Goldenberg, G. P. Smith, D. M. Golden, C. T. Bowman, R. K. Hanson, W. C. Gardiner, and V. Lissianki. Gri-mech: an optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion. Technical Report GRI-Report GRI-95/0058, Gas Research Institute, 1995.
- [13] V. Giovangigli and M. Smooke. Calculation of extinction limits for premixed laminar flames in a stagnation point flow. *J. Comput. Phys.* , 68(2):327–345, 1987.
- [14] X. J. Gu, M. Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combust. Flame* , 121:41–58, 2000.
- [15] F. Halter, C. Chauveau, N. Djebaili-Chaumeix, and I. Gokalp. Characterization of the effects of pressure and hydrogen concentration on laminar burning velocities of methane hydrogen air mixtures. *Proc. Combust. Inst.* , (30):201–208, 2005.
- [16] M. I. Hassan, K. T. Aung, and G. M. Faeth. Measured and predicted properties of laminar premixed methane/air flames at various pressures. *Combust. Flame* , 115(4):539–550, 1998.
- [17] S. Ishizuka and C. K. Law. An experimental study of extinction and stability of stretched premixed flames. In *19th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 327–335. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1982.
- [18] A. Kaufmann, F. Nicoud, and T. Poinso. Flow forcing techniques for numerical simulation of combustion instabilities. *Combust. Flame* , 131:371–385, 2002.
- [19] P. Laffitte. *La propagation des flammes dans les mélanges gazeux*. Hermann et Cie, Actualités scientifiques et industrielles, PARIS, 1939.
- [20] C. K. Law, S. Ishizuka, and M. Mizomoto. Lean limit extinction of propane/air mixtures in the stagnation point flow. In *18th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1791–1798. The Combustion Institute, Pittsburgh, Waterloo, Canada, 1981.
- [21] H. Le Chatelier. *Lecons sur le carbone, la combustion, les lois chimiques*. Hermann, 1907.

- [22] E. Mallard and H. Le Chatelier. Sur la vitesse de propagation de l'inflammation dans les mélanges explosifs. *Comptes rendus de l'Academie des Sciences, Paris*, 93:145, 1881.
- [23] E. Mallard and H. Le Chatelier. *Ann. Min.*, 4:274, 1883.
- [24] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001. 304 pp.
- [25] T. Poinso. Comments on 'flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen air flames at normal temperature and pressure' by aung et al. *Combust. Flame*, 113:279–284, 1998.
- [26] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition, 2005.
- [27] S. B. Pope. Lagrangian PDF methods for turbulent flows. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, pages 23–63, 1994.
- [28] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. Combust. Inst.*, 31(3059-3066), 2007.
- [29] G. Rozenchan, D.L. Zhu, C.K. Law, and S.D. Tse. Outward propagation, burning velocities, and chemical effects of methane flames up to 60 atm. *Proc. Combust. Inst.*, (29): 1461–1469, 2002.
- [30] R. Sankaran, E. Hawkes, J. Chen, T. Lu, and C. K. Law. Structure of a spatially developing turbulent lean methane–air bunsen flame. *Proc. Combust. Inst.*, 31:1291–1298, 2007.
- [31] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4):489–505, 2004.
- [32] G. I. Sivashinsky. Diffusional-thermal theory of cellular flames. *Combust. Sci. Tech.*, 15: 137–146, 1977.
- [33] M. D. Smooke, P. Lin, J. Lam, and M. B. Long. Computational and experimental study of a laminar axisymmetric methane-air diffusion flame. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 575–582. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [34] R. A. Strehlow and L. D. Savage. The concept of flame stretch. *Combust. Flame*, 31:209, 1978.
- [35] T. Tatsumi and T. Yoshimura. Stability of the laminar flow in rectangular duct. *J. Fluid Mech.*, 212:437–449, 1990.
- [36] K. Truffin and T. Poinso. Comparison and extension of methods for acoustic identification of burners. *Combust. Flame*, 142(4):388–400, 2005.
- [37] L. Ubbelohde and M. Hofsass. *J. Gasbeleucht*, 56(1225 and 1253), 1913.
- [38] L. Ubbelohde and E. Koelliker. *J. Gasbeleucht*, 59(49, 65, 82 and 98), 1919.
- [39] C. M. Vagelopoulos and F. Egolfopoulos. Direct experimental determination of laminar flame speeds. In *27th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 513–519. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [40] A. Van Maaren, D. S. Thung, and L. R. H. De Goey. Measurement of Flame Temperature and Adiabatic Burning Velocity of Methane/Air Mixtures. *Combust. Sci. Tech.*, 96(4): 327–344, 1994.
- [41] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 28:193 – 266, 2002.
- [42] R. V. Wheeler. *J. Chem. Soc.*, 113:840, 1918.
- [43] R. V. Wheeler. *J. Chem. Soc.*, 115:81, 1919.
- [44] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.

Annexe B

Schéma cinétique pour le méthane : GRI-Mech 3.0

Le schéma cinétique du méthane utilisé au cours de ces travaux, est le schéma GRI-Mech 3.0. Ce schéma comprend 325 réactions chimiques élémentaires avec 53 espèces chimiques. Les espèces chimiques mises en jeu par ce schéma sont listées dans le tableau B.1. Le schéma complet est disponible à l'adresse suivante :

- <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/version30/text30.html>

Espèces		Espèces		Espèces		Espèces	
1	H ₂	15	CO	29	CH ₂ CO	43	HCNN
2	H	16	CO ₂	30	HCCOH	44	HCNO
3	O	17	HCO	31	N	45	HOCN
4	O ₂	18	CH ₂ O	32	NH	46	HNCO
5	OH	19	CH ₂ OH	33	NH ₂	47	NCO
6	H ₂ O	20	CH ₃ O	34	NH ₃	48	N ₂
7	HO ₂	21	CH ₃ OH	35	NNH	49	C ₃ H ₇
8	H ₂ O ₂	22	C ₂ H	36	NO	50	C ₃ H ₈
9	C	23	C ₂ H ₂	37	NO ₂	51	CH ₂ CHO
10	CH	24	C ₂ H ₃	38	N ₂ O	52	CH ₃ CHO
11	CH ₂	25	C ₂ H ₄	39	HNO	53	Ar
12	CH ₂ (S)	26	C ₂ H ₅	40	CN		
13	CH ₃	27	C ₂ H ₆	41	HCN		
14	CH ₄	28	HCCO	42	H ₂ CN		

TAB. B.1 – Espèce chimique composant le schéma cinétique GRI-Mech 3.0

Annexe C

Schéma cinétique pour l'isooctane : le schéma de Hasse

Le schéma cinétique de l'isooctane utilisé pendant ces travaux est le schéma de Hasse et al. [38]. Ce schéma est composé de 29 espèces, données dans le tableau C.1, et de 48 réactions élémentaires, listées dans le tableau C.2.

Espèces		Espèces		Espèces		Espèces	
1	O ₂	9	CO ₂	17	C ₃ H ₄	25	T-C ₄ H ₉
2	H	10	HCO	18	C ₃ H ₅	26	A-C ₈ H ₁₇
3	OH	11	CH ₂	19	C ₃ H ₆	27	C-C ₈ H ₁₇
4	O	12	CH ₂ O	20	IC ₃ H ₇	28	IC ₈ H ₁₈
5	H ₂	13	CH ₃	21	N-C ₃ H ₇	29	N ₂
6	H ₂ O	14	C ₂ H ₂	22	IC ₄ H ₇		
7	HO ₂	15	C ₂ H ₃	23	IC ₄ H ₈		
8	CO	16	C ₂ H ₄	24	IC ₄ H ₉		

TAB. C.1 – Espèce chimique composant le schéma cinétique de l'isooctane

Réaction	A (mol.cm.s.K)	β	E (cal.mol ⁻¹)
$O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$	2,00E+14	0	16802,1
$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	5,06E+04	2,67	6285,9
$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	1,00E+08	1,6	3298,3
$2 OH \rightleftharpoons H_2O + O$	1,50E+09	1,14	100,4
$H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$	2,20E+22	-2	0,0
$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	2,30E+18	-0,8	0,0
$HO_2 + H \rightleftharpoons 2 OH$	1,50E+14	0	1003,8
$HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$	6,00E+13	0	0,0
$CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H$	6,00E+06	1,5	-740,9
$HCO + M \rightleftharpoons CO + H + M$	1,57E+14	0	15750,5
$HCO + H \rightarrow CO + H_2$	1,80E+14	0	0,0
$HCO + OH \rightarrow CO + H_2O$	1,00E+14	0	0,0
$CH_2 + O_2 \rightarrow CO + OH + H$	1,30E+13	0	1481,8
$CH_2 + O_2 \rightarrow CO_2 + H_2$	1,20E+13	0	1481,8
$CH_2O + H \rightarrow HCO + H_2$	2,30E+10	1,05	3274,4
$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	5,32E+13	0	0,0
$CH_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + OH$	3,30E+11	0	8938,8
$C_2H_2 + O \rightarrow CH_2 + CO$	3,44E+04	2,8	501,9
$C_2H_3 (+M) \rightleftharpoons C_2H_2 + H (+M)$	2,00E+14	0	39675,0
$C_2H_3 + O_2 \rightarrow C_2H_2 + HO_2$	1,21E+11	0	0,0
$C_2H_3 + O_2 \rightarrow CH_2O + HCO$	5,42E+12	0	0,0
$C_2H_4 + H \rightleftharpoons C_2H_3 + H_2$	1,70E+15	0	15033,5
$C_3H_4 + OH \rightarrow HCO + C_2H_4$	2,00E+12	0	0,0
$C_3H_5 \rightleftharpoons C_3H_4 + H$	3,00E+11	0,84	59751,4
$C_3H_5 + H \rightarrow C_3H_4 + H_2$	1,00E+13	0	0,0
$C_3H_5 + O_2 \rightarrow C_3H_4 + HO_2$	6,00E+11	0	10014,3
$H + C_3H_6 \rightarrow C_3H_5 + H_2$	5,00E+12	0	1505,7
$C_3H_6 + OH \rightarrow C_3H_5 + H_2O$	4,00E+12	0	0,0
$IC_3H_7 \rightleftharpoons H + C_3H_6$	6,30E+13	0	36806,9
$N-C_3H_7 \rightleftharpoons CH_3 + C_2H_4$	9,60E+13	0	31070,7
$N-C_3H_7 \rightleftharpoons H + C_3H_6$	1,25E+14	0	37045,9
$IC_4H_7 \rightleftharpoons C_3H_4 + CH_3$	1,00E+13	0	51147,2
$IC_4H_8 \rightleftharpoons C_3H_5 + CH_3$	5,00E+18	-1	73374,8
$IC_4H_8 + H \rightleftharpoons IC_4H_7 + H_2$	1,00E+13	0	3800,2
$IC_4H_8 + O \rightarrow IC_4H_7 + OH$	2,50E+05	2,6	-1123,3
$IC_4H_8 + O \rightarrow IC_3H_7 + HCO$	7,23E+05	2,3	-1051,6
$IC_4H_8 + OH \rightarrow IC_3H_7 + CH_2O$	1,50E+12	0	0,0

Réaction	A (mol.cm.s.K)	β	E (cal.mol ⁻¹)
$\text{IC}_4\text{H}_9 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_6 + \text{CH}_3$	1,00E+14	0	32743,8
$\text{IC}_4\text{H}_9 \rightleftharpoons \text{IC}_4\text{H}_8 + \text{H}$	2,00E+13	0	36089,9
$\text{T-C}_4\text{H}_9 \rightleftharpoons \text{H} + \text{IC}_4\text{H}_8$	3,16E+15	0	43738,0
$\text{T-C}_4\text{H}_9 + \text{O}_2 \rightarrow \text{IC}_4\text{H}_8 + \text{HO}_2$	1,17E+11	0	0,0
$\text{A-C}_8\text{H}_{17} \rightarrow \text{IC}_4\text{H}_8 + \text{IC}_4\text{H}_9$	2,60E+13	0	29636,7
$\text{C-C}_8\text{H}_{17} \rightarrow \text{IC}_4\text{H}_8 + \text{T-C}_4\text{H}_9$	1,00E+13	0	28919,7
$\text{IC}_8\text{H}_{18} \rightarrow \text{T-C}_4\text{H}_9 + \text{IC}_4\text{H}_9$	4,00E+16	0	78154,9
$\text{IC}_8\text{H}_{18} + \text{H} \rightarrow \text{A-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2$	8,44E+07	2	7696,0
$\text{IC}_8\text{H}_{18} + \text{H} \rightarrow \text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2$	1,26E+14	0	7313,6
$\text{IC}_8\text{H}_{18} + \text{OH} \rightarrow \text{A-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2\text{O}$	1,29E+10	1,1	1816,4
$\text{IC}_8\text{H}_{18} + \text{OH} \rightarrow \text{C-C}_8\text{H}_{17} + \text{H}_2\text{O}$	1,96E+12	0	454,1

TAB. C.2 – Schéma cinétique de l'isooctane