THÈSE

pour l'obtention du grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE POITIERS
École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique
(Faculté des Sciences Fondamentales et Appliquées)
(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

École Doctorale : Sciences Pour l'Ingénieur et Aéronautique
Secteur de Recherche : Énergie, Thermique, Combustion

Présentée par

Olivier ESNAULT

SUR UN MODÈLE DE COMBUSTION EN MILIEU DÉSORDONNÉ

Directeurs de Thèse : Guy JOULIN et Yves D'ANGELO

Soutenue le 22 juin 2007
devant la Commission d'Examen

— Jury —

Rapporteur	Pascal	BRUEL	*Chargé de Recherche CNRS*	*LMA, Univ. Pau*
	Yves	D'ANGELO	*Professeur*	*INSA, Univ. Rouen*
Rapporteur	Bruno	DENET	*Professeur*	*Univ. Provence*
	John	DOLD	*Professor*	*Univ. Manchester*
	Guy	JOULIN	*Directeur de Recherche CNRS*	*LCD, Univ. Poitiers*
	Jean-François	THOVERT	*Directeur de Recherche CNRS*	*LCD, Univ. Poitiers*
Président	Luc	VERVISCH	*Professeur*	*INSA, Univ. Rouen*

Remerciements

En premier lieu je voudrais remercier MM. Michel Champion et Henri Noël Presles, directeurs successifs du Laboratoire de Combustion et de Détonique (LCD – UPR 9028 du CNRS, Poitiers), pour m'avoir accueilli au sein du LCD, me permettant d'y préparer cette thèse co-financée par la Région Poitou-Charente et le CNRS.

Je remercie particulièrement Guy Joulin pour m'avoir dirigé, éclairé, éveillé et accompagné avec beaucoup de patience durant ces rien moins que quelques années. Je garderai immanquablement une trace de son contact et le souvenir de sa richesse de connaissances, de sa curiosité vivante et de ses touches d'humour.

Je suis également reconnaissant à Yves D'Angelo pour m'avoir, par sa co-direction, introduit dans la sphère du numérique, et avoir accompagné de son écoute, ses conseils et ses encouragements mes déboires de numéricien.

Je tiens à remercier Monsieur Luc Vervisch, qui m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du Jury de ma soutenance, le 22 juin 2007, ainsi que MM. Bruno Denet et Pascal Bruel, pour avoir accepté d'être les rapporteurs de mon manuscrit de thèse. Mes remerciements vont également à Monsieur John Dold – qui a bien voulu venir d'Outre-Manche pour assister à la soutenance de mes travaux – ainsi qu'à Monsieur Jean-François Thovert, pour sa participation au Jury.

Je renouvelle mes remerciements envers Monsieur Thovert, pour la discussion instructive qu'il m'a accordée au sujet de la percolation, ayant de ce fait accompagné mes réflexions sur la façon d'aborder cette partie.

Je remercie vivement MM. Bernard Sapoval et Mathis Plapp du Laboratoire de Physique de la Matière Condensée (Ecole Polytechnique). Ils m'ont accueilli l'espace de quelques heures et m'ont offert une piste de travail dont j'ai pu tirer profit.

Je remercie chaleureusement toutes les personnes que j'ai cotoyées au cours de ces années de thèse et qui ont contribué à leur donner un cadre agréable. J'exprime une pensée particulière envers ceux qui m'ont accompagné dans mes premières expériences d'enseignement, envers les secrétaires (et tout ce qu'elles peuvent être en plus, merci Jojo !), envers Hazem El-Rabii pour son appui et

ses conseils avisés, et envers tous les doctorants et stagiaires du LCD (avec une pensée redoublée pour Ruy, Vianney, Gab, Fabien, Vincent, Nicolas, Camille, Laurence, Andrès, Héléna, Bernardo, Guillaume, Philippe, Tony, Larbi,...)

Un dernier merci à Delphine, pour la patience, le soutien continu et le reprisage dans les moments difficiles.

Table des matières

Table des figures **vii**

Nomenclature **xvii**

Chapitre 1 Introduction **1**

Chapitre 2 Équations générales **7**

2.1 Introduction 8
2.2 Équations générales 9
2.3 Équations générales adimensionnées 10
2.3.1 Forme adimensionnée des équations 10
2.3.2 Équations exprimées dans un repère lié au front . . . 11
2.4 Une variante du terme de production 13

Partie I Étude d'une flamme solitaire **17**

Chapitre 3 Modèle asymptotique pour la forme du front de flamme **19**

3.1 Introduction 20
3.2 Mise en place des équations 21
3.3 Étude asymptotique 22
3.3.1 Solutions en zones externes 23
3.3.2 Étude de la zone interne 24
3.3.3 Retour sur l'étude des zones externes 26
3.3.4 Bilan 28

3.4 Un cas particulier intéressant 28
3.5 Conclusion 31

Chapitre 4 Solutions exactes d'un modèle à fonction-δ 33
4.1 Introduction 34
4.2 Équations du modèle à fonction-δ 34
4.3 Solution exacte du modèle 2D : flamme de front parabolique 37
4.3.1 Réexpression des équations en coordonnées paraboliques 37
4.3.2 Résolution proprement dite 39
4.3.3 Exploitation de la solution obtenue 40
4.4 Solution exacte du modèle 3D : flamme de front paraboloïdal 43
4.4.1 Introduction d'une nouvelle variable ω 43
4.4.2 Résolution proprement dite 44
4.4.3 Exploitation de la solution obtenue 46
4.5 Conclusion 49

Chapitre 5 Stabilité d'un front plan bidimensionnel 51
5.1 Introduction 52
5.2 Établissement de la relation de dispersion 52
5.2.1 Le modèle utilisé 53
5.2.2 Recherche des perturbations harmoniques satisfaisant le problème linéarisé 54
5.3 Étude de la relation de dispersion 57
5.3.1 Recherche de la frontière du domaine de stabilité . . 57
5.3.2 Courbes $\omega_r = \omega_r(k)$ et $\omega_i = \omega_i(k)$ 58
5.4 Quelques observations numériques sur l'instabilité de la flamme plane 62
5.4.1 Méthode utilisée 62
5.4.2 Frontière de stabilité dans le plan $n - k$ 65
5.4.3 Quelques remarques sur la forme de l'instabilité . . . 66
5.5 Synthèse et conclusion 67

Chapitre 6 Étude numérique d'une flamme de canal **75**

6.1 Introduction 76
6.2 Aspects numériques 76
6.2.1 Quelques difficultés posées par la résolution numérique 77
6.2.2 Méthode numérique utilisée 79
6.2.3 Validation et sensibilité des résultats numériques à la finesse du maillage 82
6.3 Simulation de flammes courbes : solutions stationnaires . . . 83
6.3.1 Cas de la flamme parabolique/paraboloïdale 83
6.3.2 Comparaison avec d'autres profils de réactivité . . . 89
6.3.3 Cas de stratification par la composition 94
6.3.4 Conclusion 95
6.4 Quelques observations sur les instabilités 96
6.4.1 Manifestations des instabilités 97
6.4.2 Remise en cause du critère de coincement ? 102
6.5 Conclusion 103

Partie II Flammes en milieux désordonnés **113**

Chapitre 7 Désordre, percolation et flammes en milieux inhomogènes **115**

7.1 Introduction au concept de percolation 116
7.1.1 Qu'est-ce que la percolation ? 116
7.1.2 Aspects statiques de la percolation 119
7.1.3 lois d'échelles et classes d'universalité 124
7.1.4 Conclusion 127
7.2 Modèles dynamiques de percolation appliqués à la combustion 127
7.2.1 Généralités 127
7.2.2 Modèles de type automates cellulaires 128
7.2.3 Modèles déterministes sur réseau aléatoire 129
7.2.4 Conclusion 131
7.3 Conclusion 131

Chapitre 8 Flammes en milieu désordonné : un modèle de percolation **133**

8.1 Introduction 135
8.2 Modèle de propagation d'une flamme sur un réseau de lien . 135
8.2.1 Choix du modèle 135
8.2.2 Modèle et notations 137
8.2.3 Aspects numériques 141
8.3 Premières remarques et observations qualitatives 145
8.3.1 Régime sous-critique : $p < p_c$ 145
8.3.2 Au voisinage du seuil 146
8.3.3 Cas particulier où $p = 1$ 147
8.3.4 Obstacles s'opposant à l'avancée du front lorsque $p < 1$ 148
8.3.5 Direction de propagation et corrélations transversales 149
8.3.6 Choix des définitions du front et de la vitesse moyenne 150
8.4 Résultats des simulations Monte Carlo 151
8.4.1 Caractérisation de la forme du front 152
8.4.2 Régime de saturation 165
8.4.3 Comportement au voisinage du seuil : $p \to 1/2$ . . . 178
8.4.4 Cas limite du désordre faible : $p \to 1$ 183
8.5 Synthèse et conclusion 185

Chapitre 9 Conclusion générale **187**

Annexes **195**

Annexe A Noyau de Green de l'opérateur d'advection-diffusion **195**

Annexe B Modèle à fonction-δ en milieu diffusif ($Le < +\infty$) **199**

Annexe C Détails complémentaires sur l'implémentation du modèle MVV **203**

Bibliographie **209**

Table des figures

2.1 Comparaison des fonctionnelles $f(\theta)$ définie en (2.14) (—) et $f_n(\theta)$ (∘) pour $\beta = n = 5$. Leurs valeurs s'avèrent prochent même pour des valeurs de θ distantes de 1 (le fait d'envisager $\theta > 1$ renvoit à l'éventuelle apparition d'*overshoots* lorsque la flamme considérée présente un caractère instable). Un écart conséquent apparait cependant, et se creuse, à partir de $\theta \gtrsim 1.3$ 15

2.2 Solution du problème plan. Ici $g = 1$ et $n = 5$. On note l'aspect fortement piqué de $w(x)$, également quasi-symétrique par rapport à l'origine. 16

3.1 Profil de réactivité $G(Z)$ défini suivant (3.53). 30

3.2 Courbe de réponse statique correspondant à la relation (3.54). . 30

4.1 Cadre du modèle à fonction-δ 35

4.2 Courbes isovaleurs des coordonnées paraboliques (4.12-4.13). (...) iso-η, (–) iso-ξ) 38

4.3 Champs de température (à gauche) et de fraction massique en réactif (à droite) solutions du modèle à fonction-δ pour $n = 5$ et $L = 20$ en 2D. 41

4.4 Courbes de réponse statique d'après la solution 2D du modèle à fonction-δ. De gauche à droite : $n = 5, 10, 20$. Les pointillés représentent $L_Q(n)$. 42

4.5 (+) valeurs de $L_Q(n)$ obtenues par le modèle à fonction-δ 2D. (–) Droite $y = 1.33x - 3$. 42

4.6 Isotherme paraboloïdale pour une solution 3D du modèle à fonction-δ 47

4.7 Champs de température (à gauche) et de fraction massique en réactif (à droite) solutions du modèle à fonction-δ pour $n = 5$ et $L = 20$ en 3D-axisymétrique. 48

4.8 Courbe de réponse statique pour la solution 3D axisymétrique du modèle à fonction-δ (avec $n = 5$). 48

5.1 Frontière de stabilité linéaire de la flamme plane adiabatique bidimensionnelle. Pour les grandes valeurs de k, cette frontière admet une asymptote d'équation $\beta = 3 + 4k$. 59

5.2 Évolution du taux de croissance ($Re(\omega)$) et de la pulsation ($Im(\omega)$) des différent modes pour $\beta_{eff} = 7$. 60

5.3 Taux de croissance tracés - de bas en haut - pour $\beta_{eff} = 7, 8, 4 + 2\sqrt{5}, 9, 12$. 61

5.4 Profil de vitesse U pour $n = 7.0$ et une condition intiale non perturbée. Les oscillations induites par l'instabilité, qui saturent sous l'effet des non-linéarités, présentent un régime périodique de période $T_{RP} \simeq 3.36$ temps de transit. 68

5.5 Profil de vitesse U pour $n = 6.7$ et une condition intiale perturbée avec $k = 0.75$ 69

5.6 Profil de vitesse U pour $n = 8.0$ et une condition intiale non perturbée. 70

5.7 Profil de vitesse U pour $n = 7.0$ et une condition intiale perturbée avec $k = 1.0$ 71

5.8 Séquence du champ de θ sur une période pour $n = 7.0$ et une condition intiale non perturbée. 72

5.9 Séquence du champ de θ sur une période pour $n = 8.0$ et une condition intiale non perturbée. 73

5.10 Séquence du champ de θ sur une période pour $n = 9.0$ et une condition intiale perturbée avec $k = 2.0$ 74

6.1 Courbes de réponse statique pour la flamme parabolique et pour $n = 5$. (–) courbe théorique, (•) calculs DNS. Les calculs effectués ici n'impliquent pas de valeur de L suffisamment proche de L_Q pour révéler le comportement instable. 84
6.2 Courbes de réponse statique pour la flamme paraboloïdale et pour $n = 5$. (–) courbe théorique, (•) résultats de calculs DNS. Les calculs effectués ici n'impliquent pas de valeur de L suffisamment proche de L_Q pour révéler le comportement instable. . 85
6.3 Courbes de réponse statique pour la flamme parabolique et pour $n = 6$. (–) courbe théorique, (•) résultats de calculs DNS, (■) résultats DNS moyennés sur une période. Les calculs effectués ici révèlent une première bifurcation pour $L \simeq 8$. D'autres bifurcations apparaissent pour des valeurs inférieures de L, qui ne sont pas reportées sur la figure. On note de plus l'apparition d'une extinction prématurée. 85
6.4 Solution 2D stable obtenue par DNS pour $n = 5$ et $L = 20$, et un profil de réactivité Lorentzien. (a) Fraction massique en réactif a ; (b) température θ. 86
(a) 86
(b) 86
6.5 Solution 3D-axisymétrique stable obtenue par DNS pour $n = 5$ et $L = 25$, et un profil de réactivité Lorentzien. (a) Fraction massique en réactif a (b) température θ. 87
(a) 87
(b) 87
6.6 Champs du terme de production (w) obtenus par DNS pour $n = 5$, auxquels sont supperposées les formes paraboliques de front issues du modèle à fonction-δ. (a) solution 2D Lorentzienne pour $L = 20$; (b) solution 3D-axisymétrique Lorentzienne pour $L = 25$. 88
(a) 88
(b) 88
6.7 Profils de réactivité définis par les relations (6.9-6.14). 90

6.8 Formes stationnaires obtenues pour les fronts de flamme associés aux profils de réactivité g_0 à g_5 (6.9-6.14), et pour $n = 5$ et $L = 20$. 90

6.9 (•) Points de la courbe de réponse statique pour $g_1(z)$ (Gaussien) et $n = 5$. (–) Courbe de réponse statique issue du modèle à fonction-δ pour $g_0(z)$ (Lorentzien) et $n = 5$, reproduite ici à titre indicatif, ne pouvant être objet de comparaison véritable ; et pourtant...! 91

6.10 (•) Points de la courbe de réponse statique pour $g_3(z)$ (1/2-cosinus) et $n = 5$. (–) Courbe de réponse statique issue du modèle à fonction-δ pour $g_0(z)$ (Lorentzien) et $n = 5$, reproduite ici à titre indicatif, ne pouvant être objet de comparaison. Du fait de la différence importante de valeur de L_Q entre ces deux courbes (environ 13.3 pour la première contre 3.94 pour la seconde), elles sont représentées en fonction de L/L_Q. 91

6.11 Champs de température θ associés aux solutions stationnaires obtenues pour les divers profils de réactivité (6.9-6.14). $n = 5$ et $L = 20$. 92

6.12 Champs de production w associés aux solutions stationnaires obtenues pour les divers profils de réactivité (6.9-6.14). $n = 5$ et $L = 20$. 93

6.13 Comparaison des fronts (courbes isovaleurs $a = 1/2$) obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 (6.19-6.20). 95

6.14 Comparaison des champs obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 (6.19-6.20). Haut : milieu 2 ; Bas : milieu 1. Gauche : a ; Droite : θ. 96

6.15 Comparaison des fronts (courbes isovaleurs $a = 1/2$) obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 bâtis sur g_1 (Gaussienne). . . . 97

6.16 Comparaison des champs obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 bâtis sur g_1. Haut : milieu 2 ; Bas : milieu 1. Gauche : a ; Droite : θ. 98

6.17 Définition de L_Q, L_M, L_B. La première bifurcation rencontrée lorsque L décroît depuis l'infini est un résultat de calcul. Les autres, qui apparaissent en rouge, ne sont qu'une schématisation du scénario présumé. 100

6.18 Diagramme qualitatif pour la stabilité du front dans un champ de réactivité Lorentzien. 100

6.19 Courbe $U^2 vs F(\theta_F)/F(1)$ pour un front 1D stationnaire. Les valeurs de θ_F sont obtenues en jouant sur les conditions de température et de composition en amont de la flamme. ($\times$) DNS ; (–) modèle à fonction-δ. 104

6.20 Comparaison du front instable moyen avec le front parabolique issu du modèle à fonction-δ, pour $n = 6$ et $L = 7$. (–) front moyen sur une période ; ($\times$) parabole. Un motif instantanné du front apparaît également, en vert. La vitesse moyenne de la flamme correspond également à celle du front parabolique. C'est le point (■) qui apparaît figure 6.3. 105

6.21 Profils de vitesse au voisinage de l'extinction, pour une réactivité suivant $g_3(z)$ (1/2-cosinus) et $n = 5$. Les courbes définies par $L = 13.33$ et $L = 13.35$ illustrent le comportement du système une fois atteinte la branche basse (instable) de la courbe de réponse statique (la trajectoire dans le plan de phase s'éloigne du cycle limite vers lequel elle tend pour un L légèrement supérieur).106

6.22 Comportement à proximité de L_Q pour $n = 6$. On note le doublement de période entre b) et c), et peut-être un triplement entre b) et d). 107

6.23 $n = 6$ $L = 6.5$ 108

6.24 $n = 7$ $Pe = 20$ 109

6.25 Séquence illustrant l'instabilité pour $n = 8$ 110

6.26 Séquence illustrant l'instabilité pour $n = 9$ 111

7.1 Grille de percolation de lien. $L = 20$ et $p = 0.51$. L'absence de liens horizontaux sur la ligne inférieure du réseau n'est qu'apparente : elle vient de l'utilisation de conditions aux limites périodiques suivant cette ligne. 120

7.2 Probabilité qu'existe un amas percolant sur le réseau selon L et p (effets de taille finie). 121

7.3 Evolution avec L de l'écart entre la valeur théorique du seuil (ici $p_c = 1/2$) et sa valeur effective lors de simulations numériques du fait des effets de taille finie. (•) simulations Monte-Carlo ; (–) droite de pente $-1/\nu$ avancée par la théorie. 122

7.4 Dimension fractale de l'amas percolant au seuil de percolation. (•) simulations Monte-Carlo ; (–) droite de pente 91/48 avancée par la théorie. 124

7.5 Evolution de la densité de l'amas infini avec L. (•) simulations Monte-Carlo ; (–) droite de pente β/ν avancée par la théorie. . . 125

8.1 Milieu réactif dans lequel croîssent des poches non inflammables (en noir). 136

8.2 Densité de probabilité correspondant à la définition (8.1), pour $m = 1$ et $\sigma = 2L_Q$. L'aire représentée en vert vaut exactement p. 140

8.3 Courbes $U - L$ correspondant aux modèles envisagés. (a) MVC (b) MVV. D'autres courbes peuvent être considérées, passant par exemple continûment de (0,0) à ($+\infty$,1). 141

(a) 141

(b) 141

8.4 Représentation schématique et grandeurs caractéristiques du réseau sur lequel on appuie le modèle de percolation étudié. Les sites n'ont pas été représentés sur la ligne inférieure afin de souligner le fait que, par périodicité du domaine, ce sont exactement ceux de la ligne supérieure de la grille. 142

8.5 Probabilité de percolation suivant $L_1 = L_2 = L$. 146

8.6 Amas brûlable pour diverses valeurs de $p < p_c$ et $L_1 = L_2 = 50$. Lorsqu'on s'éloigne de p_c par valeur inférieure, la flamme est très vite restreinte à une région extrêmement réduite. 147
8.7 Au voisinage du seuil ($p = 0.506$ ici), on trouve des trous sur toutes les échelles de longueur jusqu'à celle de la grille ($L_1 = 300$, $L_2 = 900$). 148
8.8 Discontinuité du front (en rouge), sous l'effet des trous présents au sein du milieu. $L_1 = 50$, $p = 0.51$, modèle MVC. 149
8.9 Régime de croissance de w. Modèle MVC et $p = 0.55$. On constate l'existence de deux phases d'exposants différents lors de l'épaississement du front. 153
8.10 Régimes de croissance de w selon p. Modèle MVC, $L = 300$. On peut voir une phase apparaître lorsque p augmente, et empiéter sur les autres phases. 154
8.11 Variations de $\tau_{1,2}$ (rouge) et $\tau_{2,sat}$ (vert) avec p. Modèle MVC, $L = 300$. 155
8.12 Variations des exposants de croissance β_1 (courbe supérieure) et β_2 (courbe inférieure) avec p. Modèle MVC. $(\cdot)$ $L = 300$; $(\times)$ $L = 512$; $(+)$ $L = 128$. 156
8.13 Variations de w_{sat} avec p et L. Cas du modèle MVC. 157
8.14 Variations de w_{sat} avec p et L. Cas du modèle MVV. 157
8.15 Variations de t_w avec p et L. Cas du modèle MVC. 158
8.16 Variations de t_w avec p et L. Cas du modèle MVV. 158
8.17 Comparaison de l'évolution avec p de t_w pour les deux modèles étudiés. 159
8.18 Évolution du front du modèle MVC pour $p = 0.55, 0.60, 0.70$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$. 160
8.19 Évolution du front du modèle MVC pour $p = 0.80, 0.90, 0.98$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$. 161
8.20 Évolution du front du modèle MVV pour $p = 0.55, 0.60, 0.70$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$. 162
8.21 Évolution du front du modèle MVV pour $p = 0.80, 0.90, 0.98$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$. 163

8.22 Évolution des fronts issus des deux modèles pour $p = 0.50$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$. 164
8.23 Variations de U_{sat} suivant p. 166
8.24 Variations de U_{sat} suivant p. La courbe pour le modèle MVV a été normée par la valeur $U_{sat}(p = 1)$. 166
8.25 Variations de m_{sat} suivant p. Modèle MVC. 167
8.26 Variations de m_{sat} suivant p. Modèle MVV. 167
8.27 Variations de $N_{af,sat}$ suivant p. Modèle MVC. 168
8.28 Comparaison des temps de saturation pour U, W, m. Modèle MVC.168
8.29 Comparaison des temps de saturation pour U selon L_1. Modèle MVC. 169
8.30 Comparaison des temps de saturation pour U, W, m. Modèle MVV.170
8.31 Comparaison des temps de saturation pour U selon L_1. Modèle MVV. 171
8.32 Dépendance suivant p et L_1 de l'épaisseur saturée du front w_{sat}, explicitée via le tracé de $w_{sat}/L_1^{1/2}$ vs $(p - p_c)L_1^{1/5}$. 173
8.33 Dépendance suivant p et L_1 du taux de disparition de masse m_{sat} (normalisé par un coefficient R permettant de rassembler les résultats des deux modèles MVC et MVV), explicitée via le tracé de $Rm_{sat}/(2L_1)$ vs p. 173
8.34 Dépendance suivant p et L_1 du nombre d'éléments actifs sur le front $N_{af,sat}$ pour le modèle MVC, explicitée via le tracé de $N_{af,sat}/L_1$ vs p. 174
8.35 Comparaison de U, $N_a/(2\,L_1)$ et N_{af}/L_1 pour le modèle MVC. . 176
8.36 Comparaison du nombre de sites actif sur et en deçà du front (MVC). 177
8.37 Loi puissance pour U_{sat} au voisinage du seuil. Modèle MVC. . . 179
8.38 Validité quasi globale de la loi puissance pour U_{sat}. Modèle MVC.179
8.39 $w_{sat}/L_1^{0.4}$ vs $(p - p_c)$ au voisinage du seuil. Modèle MVC. 180
8.40 w_{sat}/L_1 vs $(p - p_c)L_1^{1/\nu}$ au voisinage du seuil. Modèle MVC. . . 181
8.41 $m_{sat}/(2L_1)$ vs $(p - p_c)$ au voisinage du seuil. Modèle MVC. . . . 182
8.42 U_{sat} à la limite du désordre faible. Modèle MVC. 183
8.43 $m_{sat}/(2L_1)$ à la limite du désordre faible. Modèle MVC. 184

8.44 $w_{sat}/\sqrt{L_1}$ à la limite du désordre faible. Modèle MVC. 184

9.1 Courbes de réponse statique présentées lors des chapitres précédent, tracées ici en fonction de L/L_Q. La valeur de L_Q est approximative, du fait d'une extinction prématurée. 190
9.2 À gauche : paysage de composition $a(x, y)$; à droite : $\exp(\beta(a(x, y) - 1))$ avec seuillage ; ou comment un paysage de composition anodin peut suffire à définir des canaux. 193
9.3 Flammes triples se propageant le long des lignes stœchiométriques au sein d'un milieu turbulent mal mélangé, obtenues par simulation numérique directe (reproduction d'après [47], avec l'aimable autorisation de L. Vervisch) 194

A.1 Contours isovaleurs de la fonction de Green $\mathcal{G}$ associée à l'équation d'advection-diffusion. 197

B.1 Courbes de réponse statique pour diverses valeurs de Le et pour $n = 5$. À U fixé et de droite à gauche : $Le = 100$, 10, 4, 1, 0.7, 0.6. Ici $Le_c \simeq 0,69$. On note qu'il existe une valeur critique du nombre de Lewis $10 < Le < 100$ au delà de laquelle on obtient une courbe de réponse statique du type de celles obtenues pour $Le = +\infty$. 202

C.1 Détails sur l'algorithme du programme principal main(). 206
C.2 Détail sur l'algorithme de la subroutine HANDLE_GRID(). . . 207

Nomenclature

Alphabet latin

a	fraction massique en réactif adimensionnée
A	expression de a en zone interne
$a_{-\infty}(z)$	profil de a à l'infini amont
C_p	capacité calorifique massique du milieu
C^+, C^-	racines de l'équation $r^2 - r - (\omega + k^2) = 0$
E	énergie d'activation
$f(\theta)$	dépendance en température du terme de production
$f_n(\theta)$	variante de $f(\theta)$
$F(\theta)$	intégrale de f entre 0 et θ
g, g_0, ..., g_5	profils de réactivité
G	expression de g après changement d'échelle
h	intensité de pertes thermiques
k	nombre d'onde (réel)
l_r	épaisseur de la zone réactive$\sim l_T/\beta$
l_T	épaisseur de la flamme plane stationnaire
L	largeur caractéristique du canal
Le	nombre de Lewis
L_1, L_2	largeurs caractéristiques d'un canal Lorentzien 3D
L_1, L_2	(également, partie 2) longueur et largeur du réseau
L_Q	largeur du canal à laquelle apparaît l'extinction
L_B	largeur du canal à laquelle apparaît la première bifurcation
L_M	largeur de canal à laquelle apparaît l'état métastable
m_{sat}	valeur de dM/dt en régime saturé, $\equiv N_a$
n	paramètre de la fonction $f_n(\theta)$

N_a	nombre d'éléments actifs
N_{af}	nombre d'éléments actifs au sein du front
$\mathbf{n}$	vecteur normal au front
p	proportion de liens passants (percolation)
p_c	seuil de percolation
P	nombre de Péclet $\equiv UL$
P_∞	probabilité de percolation
Q	chaleur spécifique de la réaction
R	Constante des gaz parfaits
S_L	vitesse de la flamme plane stationnaire (adiab.)
S_F	vitesse de la flamme courbe stationnaire
t	temps
t_T	temps de transit à travers la flamme plane stationnaire
T	température
U	vitesse de soufflage de la flamme
U_n	vitesse normale de la flamme
U_{sat}	valeur de la vitesse du front à saturation
w	terme de production ou valeur de l'épaisseur du front
w_{sat}	valeur de l'épaisseur du front à saturation
W	terme de production ou poids du modèle à fonction-δ
x_l, y_l, z_l, t_l	système de coordonnées
x, y, z, t	système de coordonnées
X, Y, Y, t	système de coordonnées
y_A	fraction massique du réactif

Lettres grecques (et autres)

β	nombre de Zel'dovich
β_{eff}	nombre de Zel'dovich effectif
β_1, β_2	exposants de croissance
Γ_0	racine carrée $\sqrt{1+4(\omega+k^2)}$
	(valant 1 pour $(\omega+k^2)\equiv 0$)
δx, δz, δt	pas d'espace et de temps
$\delta A_{-\infty}$	$\beta(a_{-\infty}-1)$
ϵ	petit paramètre sans dimension
θ	température réduite
θ_F	valeur au front de la température réduite
t_m	temps caractéristique de saturation de m
t_u	temps caractéristique de saturation de u
t_w	temps caractéristique de saturation de w
Θ	température dans la zone interne
λ	longeur d'onde
Λ	valeur propre des équations adimensionnées
ξ, η, ζ	système de coordonnées
ξ, η	(également) coordonnées paraboliques
ξ	(également, partie 2) longueur de corrélation
ρ	masse volumique du milieu
τ	temps réduit
ϕ	forme du front de flamme infiniment mince
Φ	expression de ϕ après changement d'échelle
ν	indice de discrétisation temporelle
ω	paramètre des surfaces de niveau en 3D parabolique
ω_i	pulsation d'une perturbation harmonique
ω_r	taux de croissance d'une perturbation harmonique
Ω	valeur de ω_i sur la frontière de stabilité
$\mathcal{X}$	variable interne $\equiv X/\beta$
$\mathcal{L}$	largeur de canal en unité β

Indices, exposants, opérateurs

$(\cdot)_u$	milieu frais (unburnt)
$(\cdot)_b$	milieu brûlé (burnt)
$(\cdot)_{min}$, $(\cdot)_{max}$	bornes d'un domaine de calcul
$(\cdot)_i$, $(\cdot)_j$	indices de discrétisation spatiale
$(\cdot)^\nu$	indice de discrétisation temporelle
$X^{(0)}$, $X^{(1)}, \ldots$	coefficients du Développement Asymptotique de X
$(\cdot)^+$, $(\cdot)^-$	valeur en zone externe ((+) en aval et (-) en amont)
$(\cdot)_F$	valeur d'une grandeur sur le front de flamme
$(\cdot)_x$	dérivée par rapport à une coordonnée x
$[\![\cdot]\!]$	saut à travers la zone réactive
$\boldsymbol{\nabla}$	opérateur de gradient
Δ	Laplacien, ou discriminant d'une équation du second degré
$\hat{(\cdot)}$	perturbation d'une grandeur
$\bar{(\cdot)}$	solution de base (pour la stabilité)
$Re(\cdot)$	partie réelle
$Im(\cdot)$	partie imaginaire
t.o.t.	termes d'ordre transcendant

Chapitre 1

Introduction

La combustion constitue un vaste domaine de recherches, tant par ses applications que par les champs d'investigations qu'elle soulève. Elle met en jeu des phénomènes physiques nombreux et complexes, en interaction mutuelle : écoulements de fluides, réactions chimiques à grand nombre d'étapes, s'accompagnant d'une importante libération d'énergie, transferts de chaleur, instabilités...

À une échelle grande devant la longueur caractéristique du phénomène mis en jeu dans un problème considéré, la complexité du système dans sa description locale peut parfois s'effacer de manière étonnante du point de vue de son comportement macroscopique. Une description par des lois plus générales, dans le sens où ces lois "oublient" les processus microscopiques dont elles sont issues, devient alors possible.

De tels modèles peuvent se déduire d'approches beaucoup plus simples et notamment d'essence discrète.

Ceci est le cas par exemple des situations justiciables d'un modèle de *percolation* [43], dans le cadre desquelles les propriétés microscopiques du système s'effacent au profit de propriétés topologiques. Un modèle de percolation s'intéresse à la transmission d'une information (au sens le plus général) sur un réseau, l'information étant *a priori* relayée par des sites et des liens entre ces sites, les uns et les autres pouvant cependant se révéler défectueux selon une répartition aléatoire et des probabilités données.

Plusieurs domaines des sciences physiques [5][13][42][40], économiques [36] ou même sociales [16] ont déjà bénéficié de ces considérations et ont proposé des passages – au moyen de tels modèles de percolation – entre une représentation continue et une représentation discrète d'un phénomène.

Mettre à jour ce lien peut permettre d'envisager un problème avec un regard nouveau, dissociant les phénomènes microscopiques habituellement considérés de comportements macroscopiques, en s'appuyant sur des considérations essentiellement autres, par exemple topologiques. Ces dernières peuvent permettre la mise en valeur – pour la percolation du moins – des "relations" existant entre les entités élémentaires d'un système, c'est-à-dire comment une information est transmise entre deux entités et l'origine des limites d'une telle transmission. Il peut en résulter une description à la fois très simplifiée et très robuste, souvent

féconde, du problème considéré.

C'est une telle approche que l'on souhaite ici appliquer à un problème de combustion, en réalisant un modèle discret de flammes en milieu désordonné. Il s'agit d'un modèle simplifié, visant la mise en valeur de paramètres et phénomènes essentiels à la description du problème.

Excepté le champs d'application bien établi qu'est celui des feux de forêts[34], une telle approche reste, semble-t-il, relativement peu développée dans le milieu de la combustion. Certains régimes de combustion des sprays forment un terrain favorable [26], de même que les milieux hétérogènes [37], où des modèles de percolation sont envisagés.

Pour se convaincre de l'intérêt d'une telle tentative d'aborder la combustion dans les milieux désordonnés par le biais d'un modèle de percolation – hormis le fait qu'on se situe dans un cadre propice à cela – il suffit de considérer les échelles caractéristiques de longueur mises en jeu dans la description exhaustive d'un tel phénomène.

On envisage à cet effet le milieu désordonné comme un agglomérat de régions pouvant brûler et de régions ne le pouvant pas. L'étude est, prise dans toute sa complexité, inabordable d'un point de vue théorique. Elle repose donc essentiellement sur des simulations numériques. Au sein d'une région pouvant brûler, lorsqu'une flamme s'y propage, il existe *au mieux* un rapport de l'ordre de 10^3 entre l'échelle de longueur nécessaire pour décrire la zone de réaction de la flamme et la taille caractéristique de la région considérée. Entre cette dernière taille et l'échelle de longueur du milieu dans son entier, on trouve encore au moins un rapport de 10^2, soit au total un rapport d'échelle d'au moins 10^5 dans *une seule* direction d'espace. La description exhaustive d'un milieu ne serait–ce que bidimensionnel n'est donc pas envisageable, même numériquement.

Il est alors absolument nécessaire d'aborder le problème par une représentation simplifiée. Par ailleurs, tirant justement parti du désordre et de la grande différence d'échelles mise en jeu, la percolation semble une manière tout à fait intéressante d'envisager cette étude, et c'est le choix qui a été fait pour mener

à bien les travaux rapportés dans ce mémoire, et que l'on va présenter plus en détail.

L'étude porte sur des milieux réactifs inhomogènes. On s'intéresse plus particulièrement au cas de milieux prémélangés, c'est-à-dire au sein desquels combustible et oxydant sont *a priori* mélangés à l'échelle moléculaire. L'inhomogénéité du milieu peut être issue de l'inhomogénéité de sa composition comme d'inhomogénéités de réactivité. Face à la complexité déja évoquée du phénomène de combustion, l'objet de l'étude est restreint à des milieux se comportant comme – et demeurant malgré la flamme – des solides : ceci écarte tous phénomènes hydrodynamiques et implique l'absence de diffusion de matière au sein du milieu.

Selon le degré d'inhomogénéité considéré, les propriétés des flammes qui peuvent exister au sein du milieu réactif et les propriétés de leur propagation vont varier, de même que la façon de mener leur étude.

Dans le cas limite du désordre faible, le milieu est essentiellement homogène, et seules quelques inhomogénéités viennent perturber la propagation d'un front de flamme. On peut espérer obtenir les propriétés de la combustion dans cette situation à l'aide de méthodes perturbatives appliquées aux flammes en milieux homogènes, sans faire appel au concept de percolation.

Dans le cas limite opposé, celui du désordre fort, l'inhomogénéité du milieu est telle qu'en le traversant suivant une direction donnée, on passe sans cesse et brutalement d'une région à une autre aux propriétés réactives très différentes. C'est principalement dans cette situation qu'un modèle de percolation peut s'avérer utile, alors que d'autres méthodes sont dépassées par la complexité du problème.

On s'intéresse par la suite au cas où apparaissent au sein du milieu des chemins privilégiés pour le passage d'une flamme et on se propose de décrire cette situation au moyen d'un modèle *dynamique* de percolation, construit sur une *percolation de lien*. Les chemins privilégiés jouent le rôle de canaux au sein desquels peuvent se propager des flammes, que l'on suppose sans interaction *directe* les unes avec les autres : on néglige toute influence possible d'une flamme

sur la propagation d'une autre, les intéractions se limitant au fait qu'un canal, une fois parcouru par une flamme, est brûlé et *devient* non viable.

Le présent mémoire propose un modèle de combustion en milieu désordonné, s'appuyant sur le concept de percolation. Il se décline à travers sept chapitres.

Après un bref rappel des équations générales dans le **chapitre 2**, le contenu du mémoire est partagé en *deux parties* : l'une concerne l'étude d'une flamme se propageant le long d'un unique canal rectiligne, et cherche notamment à établir un critère permettant de modéliser ce canal par un lien passant ou au contraire coupé ; la seconde partie considère une collection de telles flammes se propageant simultanément au sein d'un même milieu désordonné.

La première partie s'ouvre au **chapitre 3**, sur une approche asymptotique de la flamme de canal. L'étude s'appuie sur l'inverse du nombre de Zel'dovich $1/\beta$ comme petit paramètre (limite des grandes énergies d'activation), et considère des grandeurs évoluant transversalement sur une largeur $L = \mathcal{O}(\beta)$, la largeur caractéristique des canaux. Il en résulte une équation au premier ordre pour la forme du front courbe stationnaire.

Toujours dans cette première partie, le **chapitre 4** présente pour la flamme courbe un modèle stationnaire à fonction-δ, dont on exhibe une solution exacte tridimensionnelle.

Le **chapitre 5** aborde des questions de stabilité à travers l'étude de stabilité linéaire de la flamme plane bidimensionnelle. Une approche numérique est également présentée.

Enfin, les résultats de simulations numériques directes de flammes courbes se propageant dans un canal font l'objet du **chapitre 6**. Une confrontation avec les résultats du modèle à fonction-δ est d'abord effectuée. On s'intéresse ensuite à divers profils de stratification, ainsi qu'à un cas de variations conjointes de réactivité et de composition. L'instabilité de la flamme courbe fait également l'objet de quelques observations.

On aborde alors la seconde partie du mémoire, dédiée au modèle de percolation établi. Elle se compose de deux chapitres. Le **chapitre 7** est un chapitre

essentiellement bibliographique. On y présente d'abord le concept de percolation, illustré par une première série de calculs ne s'intéressant qu'aux aspects géométriques de la percolation, c'est-à-dire aux propriétés du réseau seul, sans propagation d'une flamme. On évoque ensuite des modèles de croissance d'interfaces. Pour finir, c'est l'abord de problèmes de combustion au moyen de modèles de percolation qui est évoqué.

Le **chapitre 8** – dernier chapitre de l'étude – présente le modèle établi pour simuler la propagation d'une flamme en milieu désordonné. Les résultats obtenus pour deux déclinaisons du modèle y sont illustrés.

Enfin, le mémoire se termine par un chapitre de synthèse des travaux réalisés, ainsi que par quelques conclusions et perspectives.

Chapitre 2

Équations générales

Sommaire

2.1 Introduction 8

2.2 Équations générales 9

2.3 Équations générales adimensionnées 10

2.3.1 Forme adimensionnée des équations 10

2.3.2 Équations exprimées dans un repère lié au front 11

2.4 Une variante du terme de production 13

2.1 Introduction

On s'intéresse ici à un milieu réactif solide et inhomogène au sein duquel est initiée une flamme de prémélange.

L'inhomogénéité du milieu peut provenir d'une composition et/ou d'une réactivité variables (dans l'espace). Sauf mention contraire, on envisage par la suite le cas d'une réactivité variable.

Si l'on note $w_H(y_A, T)$ le terme de production rendant compte des réactions chimiques pouvant intervenir au sein d'un milieu *homogène*, alors en un point $\mathbf{x}$ d'un milieu inhomogène le terme de production chimique s'écrit[1] :

$$w(y_A, T, \mathbf{x}) = w_H(y_A, T) \cdot g(\mathbf{x})$$

où y_A désigne la fraction massique en combustible dans le milieu au point $\mathbf{x}$ considéré ; T est la température en ce même point ; et le facteur $g(\mathbf{x})$ est un champ de réactivité qui traduit l'inhomogénéité du milieu.

Dans la première partie du mémoire, on considère la propagation d'une flamme dans un "*canal*" de réactivité $g(y, z)$, c'est à dire un milieu qui n'est réactif qu'au voisinage d'un axe le long duquel la flamme se propage. La réactivité sera supposée[2] ne dépendre que des coordonnées (y, z) transversales à cet axe.

On ne prend en compte dans cette étude aucun phénomène hydrodynamique, ni aucune diffusion de matière - absence qui se traduit par un nombre de Lewis[3] infini : $Le = +\infty$. Ces hypothèses représentent un milieu se comportant comme un solide, aussi bien en amont de la flamme que du côté brûlé. Elle permet de rendre plus abordable ce problème autrement trop complexe, quitte à intégrer des considérations hydrodynamiques et la diffusion moléculaire dans une étude ultérieure, une fois la compréhension du problème mieux maîtrisée.

[1] Dans tout le texte, les notations en gras désignent des vecteurs.

[2] Dans la seconde partie du mémoire et si l'on voulait conserver une représentation continue du milieu, il conviendrait de considérer $g(\mathbf{x})$ variant suivant toutes les directions, de manière à traduire la géométrie complexe du désordre caractérisant le milieu.

[3] Le nombre de Lewis noté Le est ici le rapport de la diffusivité thermique du milieu à sa diffusivité moléculaire

Dans la section suivante sont présentées les équations générales de ce problème. Viennent alors l'introduction de grandeurs adimensionnées et l'expression des équations au moyen de ces grandeurs. Pour finir on présente une forme particulière de la loi de production, largement utilisée par la suite dans ce mémoire.

2.2 Équations générales

En l'absence de phénomènes hydrodynamiques, la description d'un milieu réactif tel qu'évoqué en introduction et soumis à la présence d'une flamme est assujettie [48] à deux équations de conservation : l'une pour l'énergie, l'autre pour les espèces chimiques.

On suppose que la réaction chimique se déroule en une seule étape irréversible, entre deux composés dont l'un est très majoritaire. La concentration de ce dernier peut donc être considérée comme constante et la conservation des espèces chimiques est traduite par une seule équation pour la fraction massique y_A du réactif minoritaire.

Dans le référentiel lié au laboratoire (x_l, y_l, z_l, t_l), le système d'équations aux dérivées partielles permettant de décrire le milieu réactif solide soumis à une flamme de prémélange s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t_l} = \boldsymbol{\nabla}.(\lambda\ \boldsymbol{\nabla} T) + Q\ w(y_A, T, \mathbf{x}_l) \tag{2.1}$$

$$\rho \frac{\partial y_A}{\partial t_l} = -w(y_A, T, \mathbf{x}_l) \tag{2.2}$$

avec

$$w(y_A, T, \mathbf{x}_l) = \frac{\rho}{t_{coll}} \cdot y_A \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \cdot g(\mathbf{x}_l) \tag{2.3}$$

où T désigne la température locale, t_{coll} un temps chimique de référence, Q la chaleur spécifique de la réaction et E l'énergie d'activation.

Les effets Dufour et Soret ont été négligés. La conductivité thermique λ du milieu et sa capacité calorifique massique C_p sont considérées constantes. Par ailleurs, le milieu demeurant solide par hypothèse, la masse volumique ρ du mélange est également supposée uniforme et constante.

2.3 Équations générales adimensionnées

2.3.1 Forme adimensionnée des équations

Une estimation des échelles caractéristiques d'épaisseur de flamme et de temps de transit d'une particule à travers la flamme permet d'adimensionner les équations de bilan.

Si l'on note S_L la célérité de la flamme plane stationnaire adiabatique se propageant dans un milieu homogène de réactivité unitaire, l'épaisseur (thermique) l_T de cette flamme est estimée selon :

$$l_T = \frac{\lambda}{\rho S_L C_p} \tag{2.4}$$

tandis que le temps de transit est de l'ordre du temps nécessaire pour parcourir cette épaisseur à la vitesse de flamme S_L :

$$t_T = \frac{l_T}{S_L} \tag{2.5}$$

Les coordonnées adimensionnées (ξ, η, ζ, τ) sont alors définies par :

$$\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}_l / l_T \tag{2.6}$$

$$\tau = t_l / t_T \tag{2.7}$$

On introduit ensuite des grandeurs réduites pour la fraction massique en réactif et pour la température :

$$\theta = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \tag{2.8}$$

$$a = y / y_u \tag{2.9}$$

où l'indice (u) renvoit au milieu frais et l'indice (b) au milieu brûlé.

La chaleur spécifique de la réaction Q est par ailleurs reliée aux sauts de température et de quantité de réactif à travers la flamme. On obtient cette relation par intégration sur tout l'espace et combinaison linéaire des relations (2.1-2.2) particularisées au cas d'une flamme plane stationnaire. Elle s'écrit :

$$T_b = T_u + \frac{Q}{C_p} y_u \tag{2.10}$$

La sensibilité du système aux variations de température est un paramètre clé de l'étude. Le nombre de Zel'dovich, noté β et défini par

$$\beta = \frac{E}{RT_b}\frac{T_b - T_u}{T_b} \tag{2.11}$$

en fournit une mesure.

On forme également le rapport :

$$\Lambda = \frac{1}{\beta}\frac{\rho}{t_{coll}}\frac{\lambda}{(\rho S_L)^2 C_p}e^{-E/RT_b} \tag{2.12}$$

et en simplifiant[4] l'expression du terme $e^{-E/RT}$ d'après le fait que w est toujours négligeable devant les autres termes lorsque T est trop différente de T_b (de plus de $(T_b - T_u)/\beta$), on obtient pour le terme de production l'expression générale qui suit :

$$\Lambda w(a, \theta, \boldsymbol{\xi}) = \Lambda \cdot a f(\theta) g(\boldsymbol{\xi}) \tag{2.13}$$

dans laquelle $f(\theta)$ désigne la dépendance en température de w et vaut :

$$f(\theta) = \beta\, e^{\beta(\theta-1)} \tag{2.14}$$

Le système d'équations adimensionnées traduisant le problème considéré se décline donc suivant les équations :

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \Delta\theta + w(a, \theta, \boldsymbol{\xi}) \tag{2.15}$$

$$\frac{\partial a}{\partial \tau} = \quad - w(a, \theta, \boldsymbol{\xi}) \tag{2.16}$$

où Δ désigne le Laplacien en coordonnées cartésiennes $\boldsymbol{\xi}$.

2.3.2 Équations exprimées dans un repère lié au front

Dans la première partie de ce mémoire, on s'intéresse à des modèles de flamme en milieu stratifié par la réactivité de telle façon qu'est formé un canal

[4] On peut écrire $e^{-E/RT} = e^{-E/RT_b} e^{\frac{E}{RT_b}\frac{T-T_b}{T}} \simeq e^{-E/RT_b} e^{\frac{E}{RT_b}\frac{T-T_b}{T_b}}$. Ceci est d'autant plus vrai que l'écart de T à T_b est faible. Lorsque ce n'est pas le cas w est négligeable et l'approximation faite – bien qu'*a priori* mauvaise – devient sans conséquence sur les solutions du problème (du moins à l'ordre dominant).

réactif. La stratification et donc la flamme y ont une direction privilégiée, qui sera portée par la coordonnée x. Ainsi x est la direction de propagation de la flamme, et la réactivité ne dépend que des autres coordonnées, à savoir les coordonnées transversales y et z dans un espace à trois dimensions.

Dans ce cadre toujours, il peut être utile de se placer dans un repère attaché à la flamme pour faire apparaître explicitement une vitesse de propagation $U(t)$ dans les équations :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + U\frac{\partial \theta}{\partial x} = \Delta\theta + w(a,\theta,y,z) \tag{2.17}$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + U\frac{\partial a}{\partial x} = \quad - w(a,\theta,y,z) \tag{2.18}$$

C'est ainsi exprimées que les équations du problème sont utilisées par la suite.

Introduite de cette manière, $U(t)$ correspond à une vitesse de "soufflage" de la flamme. Dans le cas d'une flamme stationnaire, U apparaît – à un facteur multiplicatif $1/\sqrt{\Lambda}$ près – comme la valeur du rapport de célérité entre la flamme considérée (flamme *a priori* courbe) et la flamme plane stationnaire :

$$U = \frac{1}{\sqrt{\Lambda}}\frac{S_F}{S_L} \tag{2.19}$$

Dans les cas instationnaires, la flamme ne se déplace plus "en bloc", si bien que $U(t)$ reste à définir. Ce cas n'apparaît par la suite que lors des simulations numériques. On y calcule *a posteriori* la valeur de U de façon à maintenir constante la valeur d'un des champs (θ ou a) en un point donné du domaine que l'on choisit au "nez" du front courbe.

En ce qui concerne les nouvelles coordonnées (x,y,z,t), elles ont été introduites de façon à absorber Λ dans les unités de mesure :

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\xi}\sqrt{\Lambda} \tag{2.20}$$

$$t = \tau\Lambda \tag{2.21}$$

Il ne manque plus au système pour être déterminé qu'un jeu de conditions aux limites. Celles-ci s'écrivent :

$$\theta(-\infty) = 1 - \theta(+\infty) = 0 \tag{2.22}$$

$$a(-\infty) = 1 - a(+\infty) = 0 \tag{2.23}$$

2.4 Une variante du terme de production

Dans le terme source $w(a, \theta, \mathbf{x})$ défini suivant (2.13) apparait une fonctionnelle de la température locale dont la première expression proposée est (2.14), traduisant la loi d'Arrhenius.

On peut envisager une autre expression pour $f(\theta)$, notée $f_n(\theta)$, et construite de telle façon qu'on puisse expliciter une solution plane stationnaire *exacte* en milieu homogène (i.e. $g = cte.$), et ce $\forall g \geqslant 0$. À un changement d'échelle près en U et en x, on peut se borner à chercher l'expression de $f(\theta)$ lorsque $g \equiv 1$. La question est alors : quelle $f(\theta)$ peut conduire à une solution explicitement connue du système d'équations :

$$U\frac{d\theta}{dx} = \frac{d^2\theta}{dx^2} + af(\theta) \tag{2.24}$$

$$U\frac{da}{dx} = \quad - af(\theta) \tag{2.25}$$

Notation : dans un souci de simplicité et de lisibilité de certaines expressions, on désigne parfois par θ_x la dérivée (partielle ou non, selon le contexte) d'une fonction θ dont x est l'une des variables. Dans la suite du texte, *chaque fois* qu'une coordonnée sera en indice d'une grandeur, il s'agira d'une telle dérivée.

On peut vérifier au moyen de l'identité $\theta_x = \theta(1 - \theta^n)$ que les expressions

$$\theta(x) = e^x/(1 + e^{nx})^{1/n}$$

$$U = 1$$

forment une solution de l'équation différentielle suivante :

$$U\theta_x = \theta_{xx} + w_n(\theta)$$

lorsque[5]

$$w_n(\theta) = (n + 1)\theta^{n+1}\,(1 - \theta^n)$$

[5] On peut aboutir à cette expression suivant l'idée que w doit valoir 0 pour θ valant 0 et θ valant 1 (puisque θ atteint la valeur 1 une fois que tout le réactif est consommé) et en cherchant du côté d'une généralisation de la fonction $\theta(1 - \theta)$ telle que la combustion ait préférentiellement lieu près de $\theta = 1$.

Or l'équation obtenue par sommation de (2.24) et (2.25) conduit, par intégration entre $-\infty$ et x, à l'identité :

$$a = 1 - \theta + \frac{1}{U}\theta_x$$

Si l'on y reporte l'expression de θ_x et la valeur correspondante $U = 1$ évoquées ci-dessus, on obtient :

$$a = 1 - \theta^{n+1}$$

Pour que cette dernière solution ait un sens, il faut que dans l'équation (2.24) le terme de production $af(\theta)$ s'identifie à l'expression de w_n qui a permis cette résolution. La fonction $f_n(\theta)$ correspondante est alors définie par

$$f_n(\theta) = (n+1)\theta^{n+1}\frac{(1-\theta^n)}{(1-\theta^{n+1})} \tag{2.26}$$

Elle conduit par construction à une solution exacte (définie à une translation-rotation près), représentée figure 2.2 et explicitée à travers les relations :

$$U = \sqrt{g},\ \forall n > 0, \quad \forall g = cte. \geq 0 \tag{2.27}$$

$$\theta(x) = \frac{e^{x\sqrt{g}}}{\left(1 + e^{nx\sqrt{g}}\right)^{1/n}} \tag{2.28}$$

$$a(x) = 1 - \theta^{n+1} \tag{2.29}$$

Lorsque $f_n(\theta)$ est utilisée – ce qui est notamment le cas pour les simulations numériques effectuées par la suite – la constante Λ prend la valeur 1. Ainsi, les unités de mesure spatiales et temporelle se réduisent exactement à l_T et t_T, tandis que U devient simplement le rapport S_F/S_L.

Cette formulation (2.26) mime la loi d'Arrhenius pour θ voisin de 1 et $n \gg 1$, puisqu'alors on peut écrire :

$$f_n(\theta) \simeq n\theta^n$$

et

$$\theta^n = e^{n\log\theta} = e^{n\log(1+(\theta-1))} \simeq e^{n(\theta-1)}$$

d'après le développement $\log(1+\epsilon) = \epsilon + \ldots$ pour $|\epsilon| \ll 1$.

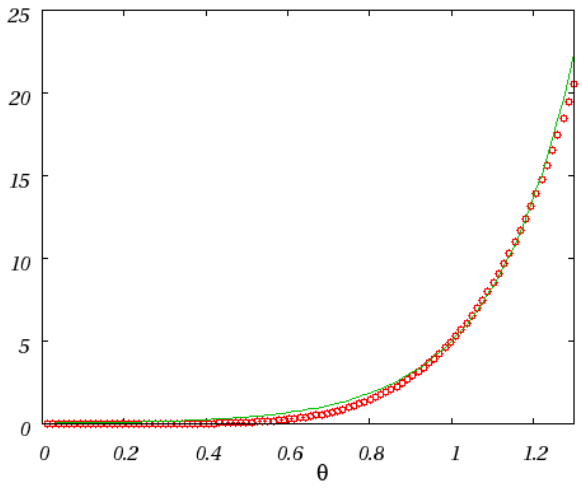


Figure 2.1 – Comparaison des fonctionnelles $f(\theta)$ définie en (2.14) (—) et $f_n(\theta)$ ($\circ$) pour $\beta = n = 5$. Leurs valeurs s'avèrent prochent même pour des valeurs de θ distantes de 1 (le fait d'envisager $\theta > 1$ renvoit à l'éventuelle apparition d'*overshoots* lorsque la flamme considérée présente un caractère instable). Un écart conséquent apparait cependant, et se creuse, à partir de $\theta \gtrsim 1.3$

Ainsi, n joue un rôle similiaire à celui du nombre de Zel'dovich β, rôle prépondérant en ce qui concerne l'éventuelle apparition d'instabilités. Une comparaison des deux expressions f et f_n est reportée sur la figure 2.1.

Bénéficier de cette solution est avantageux pour la validation des schémas numériques utilisés par la suite. Cela fournit également un moyen attrayant de construire une condition initiale pour divers calculs numériques.

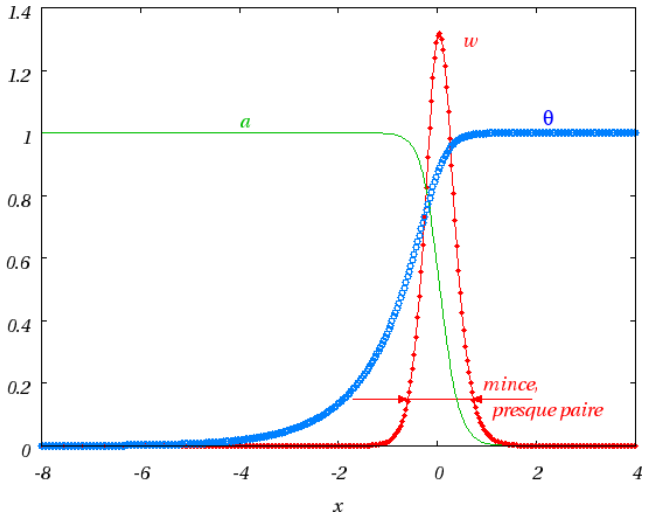


Figure 2.2 – Solution du problème plan. Ici $g = 1$ et $n = 5$. On note l'aspect fortement piqué de $w(x)$, également quasi-symétrique par rapport à l'origine.

✠

À présent que les principales notations ainsi que les équations générales du problème ont été précisées, on aborde l'étude d'une flamme de canal. L'objectif en est d'établir des modèles permettant de trouver des solutions approchées de telles flammes, de la forme de leur front, et d'en connaitre notamment la vitesse de propagation et les conditions d'extinction éventuelles.

Première partie

Étude d'une flamme solitaire

Chapitre 3

Modèle asymptotique pour la forme du front de flamme

Sommaire

3.1 Introduction 20

3.2 Mise en place des équations 21

3.3 Étude asymptotique 22

3.3.1 Solutions en zones externes 23

3.3.2 Étude de la zone interne 24

3.3.3 Retour sur l'étude des zones externes 26

3.3.4 Bilan 28

3.4 Un cas particulier intéressant 28

3.5 Conclusion 31

3.1 Introduction

Dès lors qu'on s'intéresse à la forme d'un front de flamme et qu'on en recherche une expression, il peut s'avérer utile de considérer ce front comme une interface active : surface infiniment mince décrite par une fonction $\phi(\mathbf{x})$ qui est à déterminer, ce qui fait du problème un problème à frontière libre. La notion de front de flamme ne peut être valablement introduite que du fait d'une séparation d'échelles importante (plusieurs ordres de grandeur) entre l'épaisseur de la zone réactive et les autres longueurs du problème, à savoir principalement la longueur d'onde des plissements du front et la taille du domaine d'observation.

Dans le présent chapitre, on recherche une solution approchée de flamme stationnaire se propageant dans un milieu *bidimensionnel* stratifié par sa réactivité $g(z)$ et une composition variable $a_{-\infty}(z)$. On s'attache plus particulièrement à la construction d'une équation pour la forme du front de flamme, celui-ci se courbant sous l'influence des variations de composition et de réactivité. On désigne par L la longueur caractéristique (adimensionnée, en unités l_T toujours) à l'échelle de laquelle se font ces variations.

On rappelle que ce problème est gouverné par les deux équations ci-après, traduisant les bilans de quantité de réactif et d'énergie, et dans lesquelles le terme de production s'écrit $w(a,\theta,z) = \beta a e^{\beta(\theta-1)} g(z)$:

$$U\frac{\partial\theta}{\partial x} = \frac{\partial^2\theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\theta}{\partial z^2} + w(a,\theta,z) \tag{3.1}$$

$$U\frac{\partial a}{\partial x} = \quad 0 \quad - w(a,\theta,z) \tag{3.2}$$

On introduit pour désigner le front la courbe d'équation :

$$x_F = \phi(z)$$

Déterminer la forme du front de flamme se ramène donc à la détermination de la fonction ϕ, sinon explicitement, du moins au travers d'une équation aux dérivées partielles reliant $\phi(z)$ à $g(z)$.

La résolution de ce problème étant trop complexe pour être effectuée analytiquement, c'est au moyen de la méthode des développement asymptotiques raccordés qu'il est abordé, à travers un modèle prenant $1/\beta$ pour petit paramètre et supposant $L = \mathcal{O}(\beta)$.

3.2 Mise en place des équations

Afin de simplifier la détermination des inconnues (a, θ, U, ϕ) sous forme de développements asymptotiques, on effectue divers changements de variables. Ceci a deux objectifs principaux : d'une part un changement de coordonnées de façon à ce que – dans les nouvelles coordonnées – le front soit plan, d'autre part la particularisation de l'étude par choix des ordres de grandeur.

Le petit paramètre sur lequel s'appuie l'étude est l'inverse du nombre de Zel'dovich : $1/\beta \ll 1$. Il est par ailleurs nécessaire de fixer l'ordre de grandeur de L par rapport à β. Celui-ci est imposé par l'hypothèse de travail supplémentaire selon laquelle les variations de température au niveau du front sont du même ordre de grandeur que la courbure locale : $\delta\theta_F \sim \mathcal{C}$. On convient en effet de s'intéresser à des variations de vitesse normale du front qui soient $\mathcal{O}(1)$, c'est-à-dire telles que l'effet de la courbure soit manifeste. La vitesse normale du front par rapport au milieu frais dépend à la fois de la courbure du front et de la température locale θ_F, qui résultent ici des variations de composition et de réactivité dans le milieu. On sait combien la célérité des flammes de prémélange est sensible à la température, ce suivant une loi $U_n \sim F(\beta(\theta_F - 1))$ où F est typiquement de forme exponentielle (provenant de la loi d'Arrhenius). Ainsi des variations $\mathcal{O}(1)$ de la célérité sont la conséquence de variations d'ordre seulement $\mathcal{O}(1/\beta)$ en température. La courbure locale $\mathcal{C}$ du front peut être estimée par $\mathcal{C} \sim \delta\phi_{max}/L^2$ où $\delta\phi_{max}$ est l'amplitude maximale des variations du front sur la largeur L. Par ailleurs, des variations de vitesse $\delta U = \mathcal{O}(1)$ impliquent une pente locale du front $P = \mathcal{O}(1)$. Une estimation de P s'écrit $P \sim \delta\phi_{max}/L$ si bien que $\delta\phi_{max}/L = \mathcal{O}(1)$ et du même coup $C = \mathcal{O}(1/L)$. Ceci amène finalement à considérer $L = \mathcal{O}(\beta)$. Le front est alors localement "presque plat" ($C = \mathcal{O}(1/\beta)$) et la flamme mince.

On s'attend à des variations des grandeurs selon x sur une échelle $\mathcal{O}(1)$ (qui est l'échelle sur laquelle agit le terme de diffusion de la température). L'échelle de la variable x n'a donc pas à être modifiée. On introduit tout de même une nouvelle coordonnée X permettant de ramener le front à l'origine des abscisses :

$$X = x - x_F = x - \phi(z) \tag{3.3}$$

Selon la coordonnée transversale z, on s'intéresse à des grandeurs évoluant sur l'échelle caractéristique de longueur L, donc à des $z = \mathcal{O}(\beta)$. Afin de manipuler des grandeurs d'ordre 1 on introduit la coordonnée Z :

$$Z = z/\beta \tag{3.4}$$

Pour induire des variations selon z d'ordre $\mathcal{O}(\beta)$, on s'intéresse à des variations de réactivité g d'ordre 1 sur cette échelle, ainsi qu'à des variations de composition d'ordre $1/\beta$. Ceci amène à poser :

$$g(z) = G(Z) \tag{3.5}$$

$$a_{-\infty}(z) = A_{-\infty}(Z) = 1 + \frac{1}{\beta}\delta A_{-\infty}(Z) \tag{3.6}$$

Le choix ayant été fait de particulariser l'étude à des fronts "pas trop courbes", ceux-ci s'étendent transversalement sur des distances d'ordre $\mathcal{O}(\beta)$. On introduit donc :

$$\phi(z) = \beta\,\Phi(Z) \tag{3.7}$$

(et l'on peut vérifier qu'alors $\mathcal{C} = -\phi_{zz}/(1+\phi_z^2)^{3/2} = \mathcal{O}(1/\beta)$).

Les équations du problème se ré-écrivent par conséquent sous la forme

$$\begin{aligned} U\frac{\partial\theta}{\partial X} = \left(1+\Phi_Z^2\right)\frac{\partial^2\theta}{\partial X^2} - \frac{1}{\beta}\Phi_{ZZ}\frac{\partial\theta}{\partial X} - \frac{2}{\beta}\Phi_Z\frac{\partial^2\theta}{\partial X\partial Z} + W(a,\theta,Z) \\ + \frac{1}{\beta^2}\frac{\partial^2\theta}{\partial Z^2} \end{aligned} \tag{3.8}$$

$$U\frac{\partial a}{\partial X} = \qquad 0 \qquad - W(a,\theta,Z) \tag{3.9}$$

où

$$W(a,\theta,Z) = \beta a e^{\beta(\theta-1)}G(Z) \tag{3.10}$$

3.3 Étude asymptotique

La présence de l'exponentielle dans le terme de production W implique l'existence de deux comportements très différents pour ce terme, selon l'ordre de grandeur de son argument. Lorsque $\theta - 1 = \mathcal{O}(1)$ le développement de W ne fait intervenir que des Termes d'Ordres Transcendants (t.o.t.), c'est à dire

négligeables devant toute puissance positive du paramètre $1/\beta$. Ceci est le cas en amont du front de flamme, où la température est trop faible pour que la réaction démarre. En aval de la zone réactive, le réactif a été consommé si bien que W est de nouveau négligeable, même lorsque θ est très voisin de 1.

Entre ces deux zones dites externes et décrites par $X = \mathcal{O}(1)$ se situe la zone réactive, caractérisée par une épaisseur thermique $\mathcal{O}(1/\beta)$ à laquelle correspond une épaisseur spatiale[6] également $\mathcal{O}(1/\beta)$. L'étude de la flamme au sein de cette région très mince appelée zone interne se fait après introduction d'une nouvelle coordonnée $\mathcal{X} = \beta X$ qui, lorsqu'elle décrit cette zone interne, est $\mathcal{O}(1)$ par construction.

3.3.1 Solutions en zones externes

On considère ici une valeur $X = \mathcal{O}(1)$ fixée et l'on rappelle que le terme de production W n'implique que des termes d'ordres transcendants en $1/\beta$.

On recherche la solution du problème sous la forme de développements asymptotiques en puissances de $1/\beta$ et l'on utilise l'exposant $(+)$ (resp. $(-)$) pour désigner des grandeurs se rapportant à la solution en aval de la zone réactive (resp. à la zone externe en amont). Les grandeurs du problème s'écrivent ainsi :

$$\theta^{\pm}(X,Z) = \theta^{(0)\pm}(X,Z) + \frac{1}{\beta}\theta^{(1)\pm}(X,Z) + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.11}$$

$$a^{\pm}(X,Z) = a^{(0)\pm}(X,Z) + \frac{1}{\beta}a^{(1)\pm}(X,Z) + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.12}$$

$$\Phi(Z) = \Phi^{(0)}(Z) \quad + \frac{1}{\beta}\Phi^{(1)}(Z) \quad + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.13}$$

$$U = U^{(0)} \quad + \frac{1}{\beta}U^{(1)} \quad + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.14}$$

L'équation (3.9) pour a se réduit au sein des zones externes à $a_X = 0 + [t.o.t.]$ qui, au regard des conditions à l'infini, conduit à :

$$a(X < 0, Z) = A_{-\infty}(Z) + [t.o.t.] \tag{3.15}$$

$$a(X > 0, Z) = 0 + [t.o.t.] \tag{3.16}$$

[6] Ceci est vrai pour les flammes gazeuses et le demeure pour un réactif solide (c.f. solution externe amont pour θ en $\exp(X)$ donc de pente 1 au niveau du front situé en $X = 0$).

En particulier, on peut écrire :

$$a^{(0)-}(X,Z) = 1 \tag{3.17}$$

$$a^{(0)+}(X,Z) = 0 \tag{3.18}$$

$$a^{(1)-}(X,Z) = \delta A_{-\infty}(Z) \tag{3.19}$$

$$a^{(1)+}(X,Z) = 0 \tag{3.20}$$

En reportant les développements asymptotiques dans l'équation (3.8) pour θ et après identification ordre par ordre, on obtient à l'ordre dominant (ordre 1) :

$$U^{(0)}\frac{\partial\theta^{(0)}}{\partial X} = \left[1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2\right]\frac{\partial^2\theta^{(0)}}{\partial X^2} \tag{3.21}$$

Cette équation s'intègre sous la forme :

$$\theta^{(0)\pm} = A^{\pm}e^{\frac{U^{(0)}X}{1+(\Phi_Z^{(0)})^2}} + B^{\pm} \tag{3.22}$$

La condition $\theta(+\infty) < +\infty$ impose $A^+ = 0$ tandis que la condition $\theta(-\infty) = 0$ à l'infini amont implique $B^- = 0$. Par anticipation sur les raccordements[7] des solutions externes avec la solution interne, on peut finalement écrire que $B^+ \equiv \theta_0(+\infty, Z) = 1$ et $A^- = 1$. L'ordre dominant du développement de la température en zone externe s'écrit ainsi :

$$\theta^{(0)-} = e^{\frac{U^{(0)}X}{1+(\Phi_Z^{(0)})^2}} \tag{3.23}$$

$$\theta^{(0)+} = 1 \tag{3.24}$$

3.3.2 Étude de la zone interne

Soit $\mathcal{X} = \beta X$ la variable interne, que l'on fixe à une valeur $\mathcal{O}(1)$. On se situe alors au sein de la zone interne, où l'on recherche les solutions du problème sous la forme :

$$\Theta(\mathcal{X},Z) = \quad 1 \quad + \frac{1}{\beta}\Theta^{(1)}(\mathcal{X},Z) + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.25}$$

$$A(\mathcal{X},Z) = A^{(0)}(\mathcal{X},Z) + \frac{1}{\beta}A^{(1)}(\mathcal{X},Z) + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.26}$$

[7]Par définition, les écarts de θ à 1 sont d'ordre $1/\beta$ dans la zone interne, si bien que le raccordement implique $\theta_0(0^-, Z) = \theta_0(0^+, Z) = 1$.

Dans ces conditions, le terme de production s'écrit :

$$W = \beta W^{(0)} + W^{(1)} + \mathcal{O}(1/\beta) \tag{3.27}$$

avec[8]

$$W^{(0)} = A^{(0)} e^{\Theta^{(1)}} G(Z) \tag{3.28}$$

$$W^{(1)} = A^{(1)} e^{\Theta^{(1)}} G(Z) + \Theta^{(2)} W^{(0)} \tag{3.29}$$

et à l'ordre dominant (ordre β), les équations du problème deviennent :

$$0 = \left(1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2\right) \Theta_{\mathcal{X}\mathcal{X}}^{(1)} + A^{(0)} e^{\Theta^{(1)}} G(Z) \tag{3.30}$$

$$U^{(0)} A_{\mathcal{X}}^{(0)} = \quad 0 \quad - A^{(0)} e^{\Theta^{(1)}} G(Z) \tag{3.31}$$

Par sommation de ces deux équations on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial \mathcal{X}} \left(U^{(0)} A^{(0)} - \left[1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2\right] \frac{\partial \Theta^{(1)}}{\partial \mathcal{X}} \right) = 0 \tag{3.32}$$

Les conditions aux limites nécessaires pour intégrer ces équations sont fournies par les conditions de raccordement entre solutions externes et solutions internes du problème. Il doit exister une variable d'ordre intermédiaire entre X et $\mathcal{X}$ telle que, exprimés au moyen de cette coordonnée, les développements internes et externes coïncident (à des termes exponentiellement faibles près). Il s'agit en fait d'un ensemble de *conditions nécéssaires* sans lesquelles on ne peut procéder à la résolution. Ces conditions peuvent encore s'écrire :

$$\theta^-(X \to 0^-, Z) = \Theta(\mathcal{X} \to -\infty, Z) + [t.o.t.] \tag{3.33}$$

$$\theta^+(X \to 0^+, Z) = \Theta(\mathcal{X} \to +\infty, Z) + [t.o.t.] \tag{3.34}$$

ce qui revient à identifier les conditions aux limites pour la solution interne avec les développements de Taylor des solutions externes, exprimées avec la

[8] L' expression de $W^{(0)}$ est également valable lorsque le terme de production est exprimé avec $f_n(\theta)$ et $n \gg 1$.

variable $\mathcal{X}$. On obtient de cette façon :

$$\Theta^{(0)} \equiv 1 \tag{3.35}$$

$$A^{(0)}(-\infty, Z) = 1 \tag{3.36}$$

$$A^{(1)}(-\infty, Z) = \delta A_{-\infty}(Z) \tag{3.37}$$

$$A^{(n\geq 2)}(-\infty, Z) = 0 \tag{3.38}$$

$$A^{(n\geq 0)}(+\infty, Z) = 0 \tag{3.39}$$

$$\Theta^{(1)}(-\infty, Z) = \frac{U}{1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2}\mathcal{X} + \theta^{(1)}(0^-, Z) \tag{3.40}$$

$$\Theta^{(1)}(+\infty, Z) = \theta^{(1)}(0^+, Z) \tag{3.41}$$

On peut à présent intégrer (3.32) selon $\mathcal{X}$, ce qui compte-tenu des conditions aux limites en $\mathcal{X} \to -\infty$ conduit à l'identité :

$$U^{(0)} A^{(0)} \equiv \left[1 + \left(\frac{\partial \Phi_0}{\partial Z}\right)^2\right] \frac{\partial \Theta^{(1)}}{\partial \mathcal{X}} \tag{3.42}$$

En exploitant ce résultat pour substituer $A^{(0)}$ au profit de $\Theta^{(1)}$ dans (3.30) et après intégration, il vient une relation qui peut s'écrire :

$$\frac{U^{(0)}}{\sqrt{1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2}} = \sqrt{G(Z)} e^{\theta^{(1)}(0^+, Z)/2} \tag{3.43}$$

Cette relation obtenue par analyse de la zone interne exprime comment (à l'ordre dominant) la vitesse normale de la flamme $U_n = U/\sqrt{1 + \Phi_Z^2}$ est imposée par les variations de réactivité du milieu ainsi que par la perturbation que ces mêmes variations et celles de composition entrainent sur la température au niveau du front. Au delà de la vitesse normale, c'est directement la forme du front qui est imposée par cette équation.

3.3.3 Retour sur l'étude des zones externes

Si l'on parvient à exprimer $\theta_1(0^+, Z)$ en fonction de Φ, on dispose d'une équation pour la forme du front. C'est l'objectif de ce retour sur les équations décrivant les zones externes.

Si l'on s'intéresse dans (3.8) aux termes d'ordre $1/\beta$, on obtient l'équation :

$$\begin{aligned} U^{(0)}\theta_X^{(1)} + U^{(1)}\theta_X^{(0)} = &\left[1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2\right]\theta_{XX}^{(1)} \\ &+ 2\Phi_Z^{(0)}\Phi_Z^{(1)}\theta_{XX}^{(0)} - \Phi_{XX}^{(0)}\theta_X^{(0)} - 2\Phi_Z^{(0)}\theta_{XZ}^{(0)} \end{aligned} \tag{3.44}$$

Du côté brûlé (+) et d'après (3.24), on a $\frac{\partial\theta^{(0)+}}{\partial X} = \frac{\partial^2\theta^{(0)+}}{\partial X^2} = \frac{\partial\theta^{(0)+}}{\partial X\partial Z} \equiv 0$, si bien que (3.44) prend la forme simplifiée :

$$U^{(0)}\frac{\partial\theta^{(1)}}{\partial X} = \left[1 + \left(\frac{\partial\Phi^{(0)}}{\partial Z}\right)^2\right]\frac{\partial^2\theta^{(1)}}{\partial X^2} \tag{3.45}$$

qui est semblable à l'équation (3.21) pour l'ordre dominant et s'intègre donc de la même manière, en une fonction de Z seule plus un terme exponentiel dont le facteur doit être nul pour que θ_1 demeure finie à l'infini. Il en ressort :

$$\theta^{(1)+} = \theta^{(1)}(0^+, Z) \tag{3.46}$$

On considère finalement l'équation obtenue par sommation des équations (3.8) et (3.9) :

$$U(\theta_X + a_X) = [1 + \Phi_Z^2]\theta_{XX} - \frac{1}{\beta}\Phi_{ZZ}\theta_X - \frac{2}{\beta}\Phi_Z\theta_{XZ} + \mathcal{O}(1/\beta^2) \tag{3.47}$$

qui devient après introduction des développements (3.11-3.14) :

$$\begin{aligned} U^{(0)}(\theta_X^{(1)} + a_X^{(1)}) + U^{(1)}(\theta_X^{(0)} + a_X^{(0)}) = &\left[1 + \left(\Phi_Z^{(0)}\right)^2\right]\theta_{XX}^{(1)} \\ &+ 2\Phi_Z^{(0)}\Phi_Z^{(1)}\theta_{XX}^{(0)} - \Phi_{XX}^{(0)}\theta_X^{(0)} - 2\Phi_Z^{(0)}\theta_{XZ}^{(0)} \end{aligned} \tag{3.48}$$

Cette dernière équation est valable dans tout le milieu, y compris dans le front. On peut donc l'intégrer entre $-\infty$ et 0^+. Compte-tenu de $\frac{\partial\theta^{(0)+}}{\partial X} = \frac{\partial^2\theta^{(0)+}}{\partial X^2} = \frac{\partial\theta^{(0)+}}{\partial XZ} \equiv 0$, on obtient :

$$U^{(0)}\left[\theta^{(1)}(0^+, Z) - \delta A_{-\infty}(Z)\right] = \left[1 + \left(\frac{\partial\Phi}{\partial Z}\right)^2\right]\frac{\partial\theta^{(1)}}{\partial X}(0^+, Z) - \frac{\partial^2\Phi^{(0)}}{\partial Z^2} \tag{3.49}$$

D'après (3.46), $\frac{\partial\theta^{(1)}}{\partial X}(0^+, Z) = 0$, donc l'expression recherchée pour $\theta^{(1)}$ s'écrit :

$$\theta^{(1)}(0^+, Z) = -\frac{1}{U^{(0)}}\frac{\partial^2\Phi^{(0)}}{\partial Z^2} + \delta A_{-\infty}(Z) \tag{3.50}$$

3.3.4 Bilan

Une fois l'expression (3.50) substituée à $\theta^{(1)}(0^+, Z)$ dans l'équation (3.43), on obtient une équation différentielle en Φ_Z pour l'ordre dominant de la forme du front :

$$\frac{U}{\sqrt{1+\Phi_Z^2}} = \sqrt{G(Z)} e^{\frac{\delta A_{-\infty}(Z)}{2}} \cdot e^{-\frac{\Phi_{ZZ}}{2U}} \tag{3.51}$$

On peut noter que le terme $-\Phi_{ZZ}$ s'identifie, sur l'axe $Z = 0$ et pour des fronts symétriques, à la courbure locale au nez du front (à l'ordre dominant toujours), tandis que le membre de gauche de (3.51) est la vitesse normale de la flamme par rapport au front.

Pour un milieu tridimensionnel, la relation (3.51) s'écrit de même, aux substitutions $\Phi_Z^2 \leftarrow |\boldsymbol{\nabla}\Phi|^2$ et $\Phi_{ZZ} \leftarrow \boldsymbol{\nabla}^2\Phi$ près.

Si l'on prend en compte un terme de pertes de chaleurs d'intensité $h\theta/\beta$ dans l'équation (3.8), suffisant pour impliquer à lui seul une modification d'ordre 1 de la vitesse U, une étude similaire à celle menée ici conduit à l'équation :

$$\frac{U}{\sqrt{1+\Phi_Z^2}} = \sqrt{G(Z)} e^{\frac{\delta A_{-\infty}(Z)}{2}} \cdot e^{-\frac{\Phi_{ZZ}}{2U} - \frac{h}{U^2}(1+\Phi_Z^2)} \tag{3.52}$$

3.4 Un cas particulier intéressant

Puisqu'au facteur 1/2 près l'argument de l'exponentielle dans la relation (3.51) représente $\theta^{(1)}(0, Z)$, une première idée est de rechercher un cas pour lequel la température du front serait indépendante de Z (ce qui impliquerait derrière le front une température constante aux deux premiers ordres). Pour obtenir cela à composition constante ($\delta A_{-\infty}(Z) \equiv 0$), il suffit que Φ_{ZZ} soit une constante. On écrit donc

$$\Phi_{ZZ} = \frac{1}{\mathcal{L}}$$

Une expression possible pour Φ serait alors

$$\Phi(Z) = \frac{Z^2}{2\,\mathcal{L}}$$

L'équation (3.51) s'écrit sous cette hypothèse :

$$\frac{U}{\sqrt{1+\frac{Z^2}{\mathcal{L}^2}}} = \sqrt{G(Z)} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2\,U\,\mathcal{L}}\right]$$

Cette relation est vérifiée si le profil de réactivité $G(Z)$ (tracé figure 3.1) s'écrit

$$G(Z) = \frac{1}{1 + \frac{Z^2}{\mathcal{L}^2}} \tag{3.53}$$

On reprend maintenant le problème dans le sens direct, et l'on choisit pour profil de réactivité celui défini par (3.53). Un front parabolique est donc solution du problème (il a été construit comme cela) dès qu'est vérifiée une condition d'existence imposée par les termes constants de l'équation, restés après simplification des termes en racine carrée. Cette relation prend la forme :

$$U = \exp\left[-\frac{1}{2\,U\,\mathcal{L}}\right] \tag{3.54}$$

ou encore

$$\frac{1}{\mathcal{L}} = 2U \log \frac{1}{U} \tag{3.55}$$

Cette condition restreint les valeurs de U accessibles pour une valeur donnée de $\mathcal{L}$. Plus intéressant encore, elle fait apparaitre (figure 3.2) une valeur critique $\mathcal{L}_Q$ de $\mathcal{L}$ au dessous de laquelle il n'existe[9] plus de valeur de $U > 0$ permettant de satisfaire (3.54), et qui vaut en unités β :

$$\mathcal{L}_Q = \frac{e}{2} \simeq 1.36 \tag{3.56}$$

Pour $L < L_Q$, seule la solution $U = 0^+$ vérifie (3.54) (flamme éteinte). Ceci met donc à jour l'extinction de la flamme pour des largeurs caractéristiques de canal $L \equiv \beta\mathcal{L}$ trop étroites : $L < L_Q = \beta \cdot e/2$.

[9] La branche $U = 0^+$ est solution de (3.54) quelle que soit la valeur de $\mathcal{L}$, puisque $0^+ = e^{-1/0^+}$.

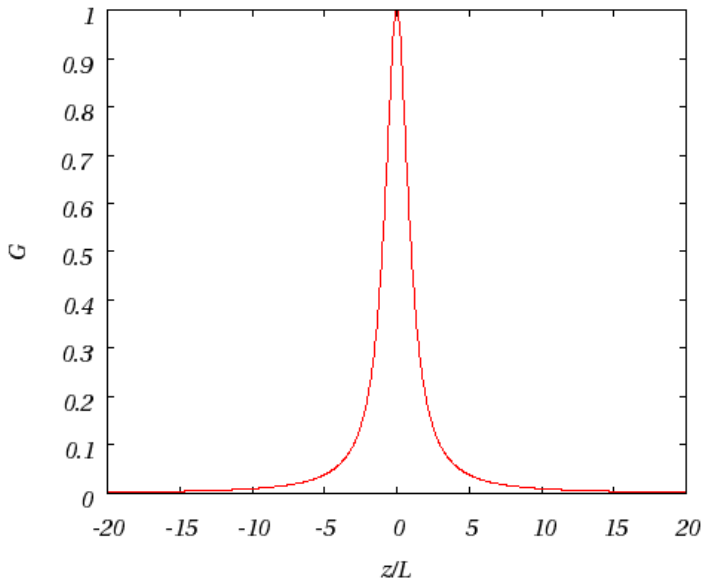


Figure 3.1 – Profil de réactivité $G(Z)$ défini suivant (3.53).

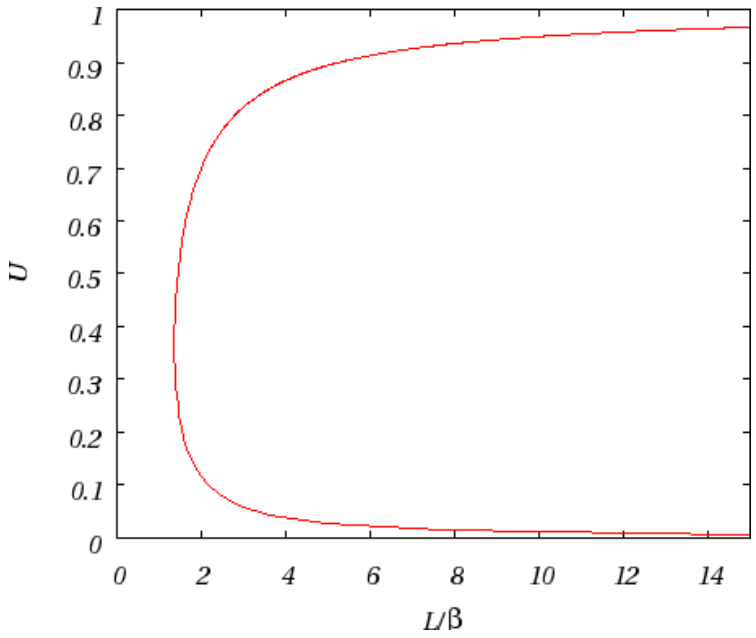


Figure 3.2 – Courbe de réponse statique correspondant à la relation (3.54).

3.5 Conclusion

Par le biais d'une étude asymptotique, la structure de flammes se propageant en milieu solide à composition et/ou réactivité variables peut être entrevue.

En particulier, cette étude permet de proposer une équation, à l'ordre dominant, pour la forme du front de flamme. La méthode, si on la poursuit aux ordres supérieurs, pourrait permettre en outre de préciser cette équation. Des flammes dont le front est quasi-parabolique et quasi-isotherme (isotherme aux deux premiers ordres) sont solutions de cette équation. Elles correspondent à un groupement $g(z)\exp\left(\beta(a_{-\infty}(z)-1)\right)$ prenant la forme :

$$g(z)\cdot e^{\beta(a_{-\infty}(z)-1)} = \frac{1}{1+\frac{z^2}{L^2}}$$

où L représente une largeur caractéristique du canal (cette fois en unités l_T). L'existence de ces solutions est conditionnée par la valeur de L, qui doit être supérieure à une valeur L_Q proportionnelle à β pour des valeurs de β suffisamment grandes. Ceci laisse présager l'extinction des flammes lorsqu'elles tentent de se propager dans des canaux trop étroits.

Chapitre 4

Solutions exactes d'un modèle à fonction-δ

Sommaire

4.1 Introduction 34

4.2 Équations du modèle à fonction-δ 34

4.3 Solution exacte du modèle 2D : flamme de front parabolique 37

4.3.1 Réexpression des équations en coordonnées paraboliques 37

4.3.2 Résolution proprement dite 39

4.3.3 Exploitation de la solution obtenue 40

4.4 Solution exacte du modèle 3D : flamme de front paraboloïdal 43

4.4.1 Introduction d'une nouvelle variable ω 43

4.4.2 Résolution proprement dite 44

4.4.3 Exploitation de la solution obtenue 46

4.5 Conclusion 49

4.1 Introduction

L'étude asymptotique des flammes courbes en milieu se comportant comme un solide montre qu'il suffit que les variations de réactivité s'effectuent sur une échelle au moins $\mathcal{O}(\beta)$ pour être en présence de flammes minces. Cette caractéristique permet, à l'échelle des déformations du front sous l'effet de la stratification du milieu, de considérer la zone réactive comme infiniment mince, c'est-à-dire comme une interface active.

On présente ici un modèle *stationnaire* utilisant cette représentation du front comme une surface séparant les milieux frais et brûlé, dans lesquels température et fraction massique en réactif ne sont plus soumis qu'à des termes d'advection et de diffusion.

Après une présentation du modèle en question, on montre qu'il est possible d'en expliciter une solution exacte, que la flamme se propage dans un milieu bidimensionnel ou tridimensionnel. Ces solutions permettent notamment de discuter des conditions d'existence d'une solution stationnaire.

4.2 Équations du modèle à fonction-δ

Un modèle à fonction-δ s'applique à une classe de flammes dont le front est mince, dans le sens où son épaisseur caractéristique est petite devant les autres échelles de longueur et notamment devant la longueur caractéristique de ses déformations (Figure 4.1). Le front est alors considéré comme infiniment mince, donc comme une surface réactive d'équation $x = x_F(\mathbf{x}) = \phi(y, z)$ (lorsque le front ne présente pas de replis) au niveau de laquelle le réactif disparait, consommé par la flamme.

On peut donc décrire le champ de fraction massique du réactif au moyen d'un "step" (une fonction de Heaviside H) :

$$a(x, y, z) = 1 - H(x - x_F(y, z)) \tag{4.1}$$

Le terme de production est, d'après (2.18) et pour une solution stationnaire, proportionnel à la dérivée partielle de a suivant x. Étant donné que la dérivée d'une fonction de Heaviside est une distribution de Dirac ($\partial H(x - x_F)/\partial x =$

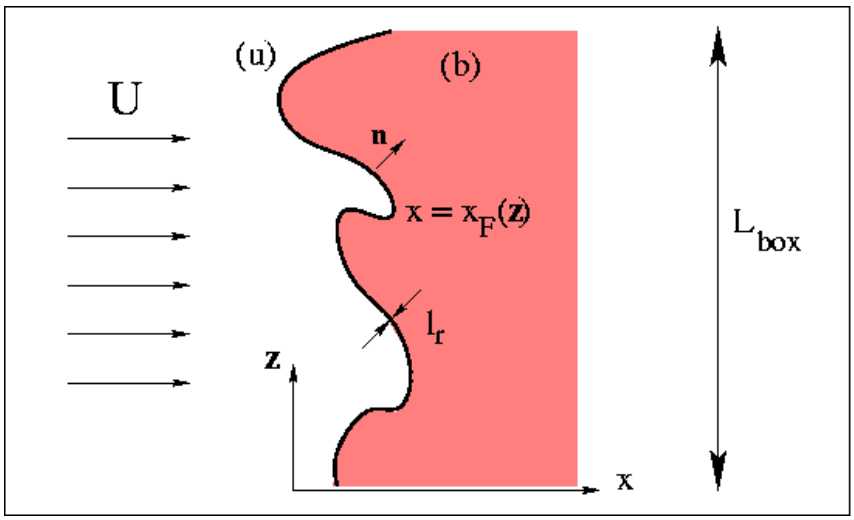


Figure 4.1 – Cadre du modèle à fonction-δ

$\delta(x - x_F)$), w prend la forme d'un Dirac pondéré :

$$w = W \cdot \delta(x - \phi(y, z)) \tag{4.2}$$

D'après (2.18) toujours, la pondération W doit vérifier une première relation selon laquelle elle est égale à U :

$$W = U \tag{4.3}$$

La pondération W est une fonction du point considéré $\mathbf{x}$ et de la température θ_F du front au point considéré. On la définit de la manière suivante :

$$W^2 = g(\mathbf{x}) \left(\frac{F(\theta_F)}{F(1)} \right) (1 + |\boldsymbol{\nabla}\phi|^2) \tag{4.4}$$

où $F(\theta_F)$ est exprimée à partir de la dépendance en température $f(\theta)$ considérée dans le terme de production des équations générales, que cette dernière corresponde à une loi d'Arrhénius ou bien à la forme mimétique $f_n(\theta)$:

$$F(\theta) = \int_0^\theta f(T) dT \tag{4.5}$$

La forme (4.4) proposée pour W appelle quelques commentaires : le terme $g(\mathbf{x})$ permet d'assurer l'égalité $U = \sqrt{g}$ dans le cas d'une flamme plane et lorsque $g = cte.$, relation évoquée en (2.27) ; le rapport $F(\theta_F)/F(1)$ permet d'assurer la

relation $U^2 = F(\theta_F)/F(1)$ pour une flamme plane dans un milieu de réactivité unitaire mais pour $\theta_F \neq 1$; le dernier terme $(1 + |\boldsymbol{\nabla}\phi|^2)$ est quant à lui un facteur d'origine géométrique permettant de vérifier que la vitesse normale de propagation d'une flamme oblique dans un milieu homogène à $g \equiv 1$ et pour $\theta_F = 1$ est bien unitaire.

Le champ de fraction massique étant déterminé – dans le cadre d'un tel modèle – dès qu'est connue la forme du front, ne reste qu'à déterminer cette forme et à résoudre l'équation en température. De part et d'autre du front, celle-ci se réduit à :

$$U\frac{\partial\theta}{\partial x} = \boldsymbol{\nabla}^2\theta, \quad \forall(x,y,z) \neq (x_F(y,z),y,z) \tag{4.6}$$

Les solutions obtenues séparément pour les milieux frais et brûlé sont reliées par deux relations de saut à travers le front. La première impose la continuité de la température à travers la zone réactionnelle, et la seconde – qui est une conséquence de (4.4) – fixe le saut à travers le front du gradient normal de température :

$$[\![\theta]\!] = 0 \tag{4.7}$$

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}\theta]\!] = -\overline{W} = -\frac{W}{\sqrt{1+|\boldsymbol{\nabla}\phi|^2}} \tag{4.8}$$

où $[\![X]\!] = X(x_F^+,z) - X(x_F^-,z)$, et $\mathbf{n}$ désigne le vecteur unitaire normal au front, dirigé vers le milieu brûlé.

On s'intéresse ici à un modèle stationnaire, mais l'on peut noter que dans le cadre d'un modèle instationnaire, la relation (4.4) est conservée, tandis que (4.3) est remplacée par :

$$W = U - \frac{\partial x_F(y,z,t)}{\partial t} \tag{4.9}$$

Deux conditions aux limites sont par ailleurs nécessaires : l'une au niveau du front, et l'autre à l'infini amont, qui permettent l'intégration de (4.6) du côté non brûlé. Elles s'écrivent :

$$\theta(-\infty,y,z) = 0 \tag{4.10}$$

$$\theta(x_F,y,z) = \theta_F \tag{4.11}$$

Une grandeur demande encore à être précisée si l'on veut résoudre ce modèle et c'est d'ailleurs elle qui permet d'en exhiber une solution exacte : il s'agit de l'expression du profil de réactivité $g(\mathbf{x})$ au sein du milieu. On montre à présent qu'on est à même de mener la résolution de façon exacte jusqu'à son terme pour une forme bien particulière du profil de réactivité, laquelle est introduite de manière déductive au cours des calculs qui suivent.

4.3 Solution exacte du modèle 2D : flamme de front parabolique

4.3.1 Réexpression des équations en coordonnées paraboliques

On montre ici que le modèle à fonction-δ admet une solution dont le front est isotherme[10] ($\theta_F = cte.$) et de forme parabolique. C'est donc en coordonnées paraboliques que l'on cherche ici à résoudre le problème. Ces coordonnées (ξ, η) sont définies par :

$$x = \eta - \xi \tag{4.12}$$

$$z = 2\sqrt{\eta\xi} \tag{4.13}$$

$$\eta, \xi \geq 0$$

Dans le plan cartésien, leurs courbes isovaleurs (ξ_0, η_0) sont des paraboles dont l'axe x est axe de symétrie (figure 4.2), et d'équations :

$$x = \frac{z^2}{4\xi_0} - \xi_0 \tag{4.14}$$

$$z = \eta_0 - \frac{x^2}{4\eta_0} \tag{4.15}$$

[10] L'idée de rechercher une solution présentant un front isotherme est à rapprocher du cas particulier évoqué lors du chapitre précédent.

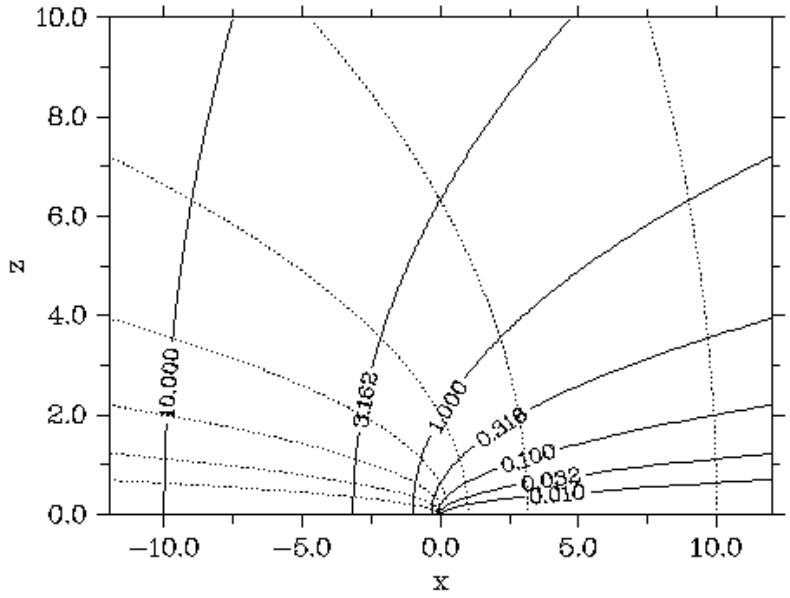


Figure 4.2 – Courbes isovaleurs des coordonnées paraboliques (4.12-4.13). (...) iso-η, (–) iso-ξ)

Les éléments de la métrique attachés aux coordonnées paraboliques (mutuellement orthogonales) valent :

$$h^\xi = \sqrt{\frac{\xi+\eta}{\xi}} \tag{4.16}$$

$$h^\eta = \sqrt{\frac{\xi+\eta}{\eta}} \tag{4.17}$$

si bien que dans ces coordonnées, l'équation (4.6) pour θ devient, dans le milieu frais :

$$-U\sqrt{\xi}\frac{d\theta}{d\xi} = \frac{d}{d\xi}\left(\sqrt{\xi}\frac{d\theta}{d\xi}\right) \tag{4.18}$$

et la condition sur la température à l'infini amont du milieu (qui se définit alors par $\xi = +\infty$) s'écrit :

$$\theta(+\infty) = 0 \tag{4.19}$$

Si une solution particulière présentant un front parabolique existe, il doit exister une courbe d'isovaleur ξ_F représentant le front. Et si le front est isotherme, aucun gradient ne saurait apparaître en aval du front (la flamme est

globalement adiabatique), si bien que tout le milieu brûlé doit être à la même température θ_F que le front. Ainsi, la condition de température au niveau du front devient :

$$\theta(\xi_F) = \theta_F \tag{4.20}$$

tandis que le saut du gradient normal de température à travers le front – compte-tenu de l'hypothèse $\partial\theta/\partial\eta \equiv 0$ et du fait que, normalement à la parabole iso-ξ_F, $dn \equiv ds|_{\eta=cte} = -d\xi \cdot h^{\xi}(\xi_F, \eta)$ si l'on fait pointer la direction normale vers les ξ décroissants (i.e. le milieu brûlé) – prend la forme :

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}\theta]\!] \equiv \frac{d\theta}{d\xi}\sqrt{\frac{\xi_F}{\xi_F+\eta}} \tag{4.21}$$

4.3.2 Résolution proprement dite

L'équation (4.18) pour la température dans le milieu frais conduit, après deux intégrations successives introduisant les constantes C_1 et C_2, à l'expression :

$$\theta = C_1 \int_{\xi}^{+\infty} e^{-U\lambda}\frac{d\lambda}{\sqrt{\lambda}} + C_2 \tag{4.22}$$

La condition (4.19) en $\xi = +\infty$ impose $C_2 = 0$ tandis que la condition au front (4.20) conduit à l'expression finale de θ :

$$\theta(\xi) = \theta_F \frac{\int_{\xi}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda}}{\sqrt{\lambda}} d\lambda}{\int_{\xi_F}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda}}{\sqrt{\lambda}} d\lambda} \tag{4.23}$$

On est alors à même de calculer le terme $d\theta/d\xi$ apparaissant dans (4.21), équation de laquelle découle l'identité suivante, grâce à (4.4) :

$$\frac{\xi_F}{\xi_F+\eta}\left(\theta_F \frac{e^{-U\xi_F}/\sqrt{\xi_F}}{\int_{\xi_F}^{+\infty} e^{-U\xi}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}}\right)^2 = g(2\sqrt{\eta\xi_F})\frac{F(\theta_F)}{F(1)} \tag{4.24}$$

Cette équation doit être vérifiée $\forall\eta$, ce qui implique la proportionnalité des termes dépendants de cette variable, c'est-à-dire :

$$\frac{\xi_F}{\xi_F+\eta} \propto g(2\sqrt{\eta\xi_F}) \tag{4.25}$$

Cette condition est remplie lorsque le profil de réactivité g suit la loi Lorentzienne

$$g_{L,2D} = \frac{1}{1+\frac{z^2}{L^2}} \tag{4.26}$$

ce qui conduit par ailleurs à l'expression de ξ_F en fonction de la largeur caractéristique L du canal réactif :

$$\xi_F = \frac{L}{2} \tag{4.27}$$

Une fois la forme adéquate pour $g(\mathbf{x})$ introduite, (4.3) conduit à une première relation entre U et θ_F s'écrivant :

$$U = \sqrt{\frac{F(\theta_F)}{F(1)}} \tag{4.28}$$

tandis que (4.24) se réduit – en tenant justement compte de (4.28) – à une seconde relation entre U et θ_F, achevant la résolution du problème :

$$\theta_F = \sqrt{\xi_F} U e^{U\xi_F} \int_{\xi_F}^{+\infty} e^{-U\xi} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}} \tag{4.29}$$

Cette dernière équation apparaît comme la particularisation au front de la formule plus générale :

$$\theta = \sqrt{\xi_F} U e^{U\xi_F} \int_{\xi}^{+\infty} e^{-U\lambda} d\lambda/\sqrt{\lambda} \tag{4.30}$$

$$\theta_F = \theta(\xi_F) \tag{4.31}$$

4.3.3 Exploitation de la solution obtenue

Il existe donc une solution du modèle à fonction-δ présentant un front parabolique isotherme. Elle est définie au travers de l'ensemble des relations (4.27) (4.30) (4.31) et (4.28).

Les champs de température et de fraction massique correspondants sont représentés figure 4.3.

On est également à même de tracer les courbes de réponse statique : le lieu des solutions, à n (ou β) fixé, dans le plan L, U. Pour leur tracé, il peut être

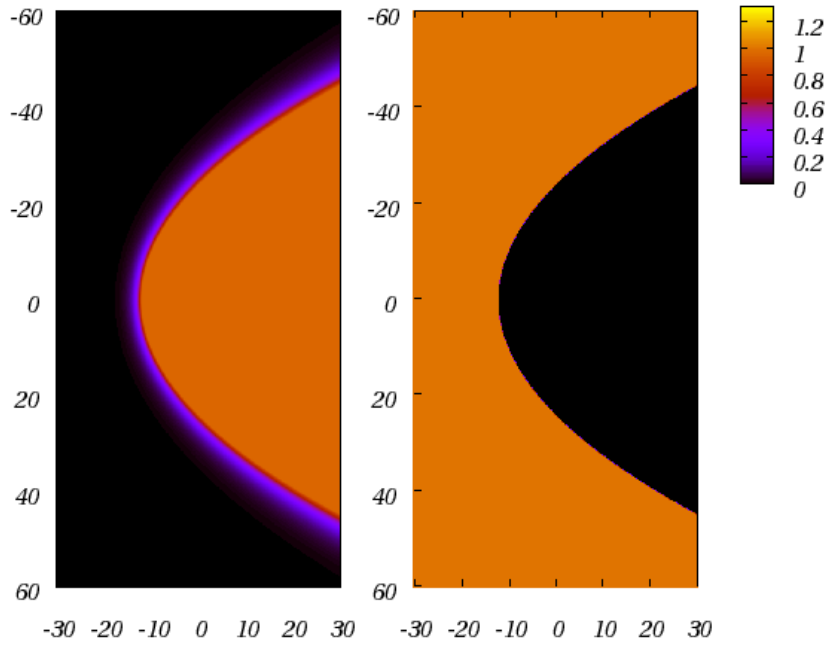


Figure 4.3 – Champs de température (à gauche) et de fraction massique en réactif (à droite) solutions du modèle à fonction-δ pour $n = 5$ et $L = 20$ en 2D.

commode d'introduire un paramétrage selon un nombre de Péclet $P = UL$. La formule (4.30) donnant θ peut alors s'écrire :

$$\theta(\xi) = \int_{U(\xi-\xi_F)}^{+\infty} e^{-\lambda} d\lambda / \sqrt{1 + \frac{2\lambda}{P}} \tag{4.32}$$

En se donnant une valeur de $P \in]0, +\infty[$, on commence par calculer θ_F d'après (4.32). La valeur de U s'obtient alors directement d'après (4.28), ce qui permet finalement de déterminer $L = P/U$.

Une dernière remarque peut être ajoutée ici, à savoir que la température peut être explicitée au moyen de la fonction erreur complémentaire (erfc). L'expression de θ correspondante s'écrit :

$$\theta(\xi) = \theta_F \frac{\mathrm{erfc}(\sqrt{U\xi})}{\mathrm{erfc}(\sqrt{U\xi_F})}, \qquad \xi_F = \frac{L}{2} \tag{4.33}$$

Le modèle à fonction-δ donne accès de façon presque immédiate aux courbes de réponse statique et dans leur entier, tandis qu'un calcul DNS conduisant à un unique point implique un coût CPU important.

Figure 4.4 apparaissent de telles courbes, basées sur l'utilisation de $f_n(\theta)$ pour trois valeurs de n. On y constate que le modèle à fonction-δ admet des solutions exactes indépendamment des valeurs de n et de L, pourvu que L soit supérieure à une valeur L_Q. Cette dernière (Fig. 4.5) varie quasi-linéairement avec n, avec une pente $1.33 \simeq e/2$, en accord avec l'analyse asymptotique à n grand (grand signifiant ici dès $n \simeq 5$).

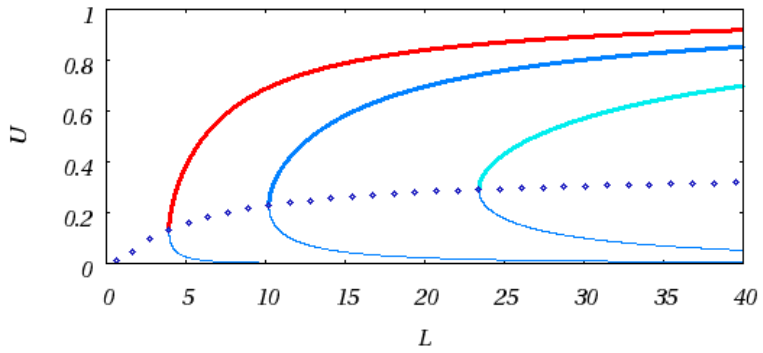


Figure 4.4 – Courbes de réponse statique d'après la solution 2D du modèle à fonction-δ. De gauche à droite : $n = 5, 10, 20$. Les pointillés représentent $L_Q(n)$.

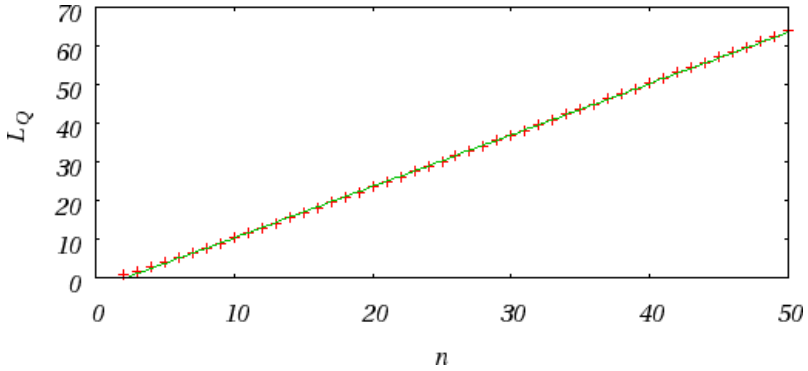


Figure 4.5 – (+) valeurs de $L_Q(n)$ obtenues par le modèle à fonction-δ 2D. (–) Droite $y = 1.33x - 3$.

4.4 Solution exacte du modèle 3D : flamme de front paraboloïdal

4.4.1 Introduction d'une nouvelle variable ω

Comme dans le cas bidimensionnel, on s'intéresse à des solutions dont le front est isotherme et de température θ_F. On recherche cette fois des solutions ne dépendant que d'une variable ω définie ci-dessous, telle que les surfaces iso-ω soient des paraboloïdes elliptiques (Horway-Cahn [19]) :

$$\frac{y^2}{\omega + L_1} + \frac{z^2}{\omega + L_2} - \omega = 2x \tag{4.34}$$

On recherche le champ de température directement sous la forme :

$$\theta = \theta_F \cdot \Phi(\omega) \tag{4.35}$$

Le milieu frais à l'infini amont de la flamme correspondant à $\omega = +\infty$, les conditions aux limites utilisées s'écrivent :

$$\theta(+\infty) = 0 \tag{4.36}$$

$$\theta(\omega_F) = \theta_F \tag{4.37}$$

Introduite dans l'équation d'advection-diffusion que doit vérifier θ, (4.35) conduit à la relation (on note $'$ la dérivée par rapport à ω) :

$$\frac{\Phi''(\omega)}{\Phi'(\omega)} = \frac{-U\frac{\partial \omega}{\partial x} - \boldsymbol{\nabla}^2\omega}{(\boldsymbol{\nabla}\omega)^2} \tag{4.38}$$

Par différenciation de (4.34), on accède aux dérivées partielles de ω par rapport aux variables x, y, z. Pour simplifier les expressions, on introduit une fonction Γ définie selon :

$$\Gamma(y,z) = 1 + \frac{y^2}{(\omega + L_1)^2} + \frac{z^2}{(\omega + L_2)^2} \tag{4.39}$$

La notation $(\cdot)_x = \frac{\partial(\cdot)}{\partial x}$ est encore utilisée.

$$\Gamma\, \omega_x = -2 \tag{4.40}$$

$$\Gamma\, \omega_y = \frac{2y}{(\omega + L_1)} \tag{4.41}$$

$$\Gamma\, \omega_z = \frac{2z}{(\omega + L_2)} \tag{4.42}$$

$$\Gamma_x\,\omega_x + \Gamma\,\omega_{xx} = 0 \tag{4.43}$$

$$\Gamma_y\,\omega_y + \Gamma\,\omega_{yy} = 2\frac{(\omega + L_1) - y\omega_y}{(\omega + L_1)^2} \tag{4.44}$$

$$\Gamma_z\,\omega_z + \Gamma\,\omega_{zz} = 2\frac{(\omega + L_2) - z\omega_z}{(\omega + L_2)^2} \tag{4.45}$$

avec

$$\Gamma_y = \frac{2y}{(\omega + L_1)^2} - \frac{2y^2\omega_y}{(\omega + L_1)^3} - \frac{2z^2\omega_y}{(\omega + L_2)^3} \tag{4.46}$$

$$\Gamma_z = \frac{2z}{(\omega + L_2)^2} - \frac{2y^2\omega_z}{(\omega + L_1)^3} - \frac{2z^2\omega_z}{(\omega + L_2)^3} \tag{4.47}$$

On peut ainsi déterminer $(\nabla\omega)^2$ et $\nabla^2\omega$ selon :

$$\Gamma(\boldsymbol{\nabla}\omega)^2 = \Gamma(\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2) = 4 \tag{4.48}$$

$$\Gamma(\boldsymbol{\nabla}^2\omega) = \frac{2}{\omega + L_1} + \frac{2}{\omega + L_2} \tag{4.49}$$

ce qui permet d'obtenir pour (4.38) la forme suivante :

$$\frac{\Phi''(\omega)}{\Phi'(\omega)} = \frac{-U - \left(\frac{1}{\omega+L_1} + \frac{1}{\omega+L_2}\right)}{2} \tag{4.50}$$

qui ne dépend que de ω, alors que toutes les grandeurs intermédiaires – du fait de la présence de Γ – dépendent de y et de z.

4.4.2 Résolution proprement dite

En intégrant deux fois la dernière relation (4.50), on obtient l'expression de $\Phi(\omega)$:

$$\Phi(\omega) = C_1 \int_{\omega}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2} d\lambda}{\sqrt{(\lambda + L_1)(\lambda + L_2)}} + C_2 \tag{4.51}$$

Les conditions aux limites (4.36-4.37) permettent de déterminer les constantes C_1 et C_2 introduites. Tous calculs faits on obtient :

$$\theta = \theta_F \frac{\int_{\omega}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2} d\lambda}{\sqrt{(\lambda+L_1)(\lambda+L_2)}}}{\int_{\omega_F}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2} d\lambda}{\sqrt{(\lambda+L_1)(\lambda+L_2)}}} \tag{4.52}$$

On peut à présent calculer $\boldsymbol{\nabla}\theta$ et donc le saut du gradient normal de température à travers le front. Le vecteur normal unitaire et dirigé vers le milieu brûlé s'écrit :

$$\mathbf{n} = -\frac{1}{\sqrt{1+\frac{y^2}{(\omega+L_1)^2}+\frac{z^2}{(\omega+L_2)^2}}} \left| \begin{array}{l} -1 \\ y/(\omega+L_1) \\ \\ z/(\omega+L_2) \end{array} \right. \tag{4.53}$$

Le gradient de température s'écrit :

$$\boldsymbol{\nabla}\theta = \theta_F \Phi'(\omega) \left| \begin{array}{l} \omega_x \\ \omega_y \\ \omega_z \end{array} \right. \tag{4.54}$$

On obtient par produit scalaire

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}\theta]\!] = -\frac{2\theta_F}{\sqrt{1+\frac{y^2}{(\omega+L_1)^2}+\frac{z^2}{(\omega+L_2)^2}}} \frac{e^{-U\omega_F/2}/\sqrt{(\omega_F+L_1)(\omega_F+L_2)}}{\int_{\omega_F}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2}d\lambda}{\sqrt{(\lambda+L_1)(\lambda+L_2)}}} \tag{4.55}$$

si bien que (4.8) prend la forme suivante :

$$\frac{2\theta_F}{\sqrt{1+\frac{y^2}{(\omega_F+L_1)^2}+\frac{z^2}{(\omega_F+L_2)^2}}} \frac{e^{-U\omega_F/2}/\sqrt{(\omega_F+L_1)(\omega_F+L_2)}}{\int_{\omega_F}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2}d\lambda}{\sqrt{(\lambda+L_1)(\lambda+L_2)}}} = \sqrt{\frac{F(\theta_F)}{F(1)}g(y,z)} \tag{4.56}$$

De même que dans le cas bidimensionnel, pour qu'existe une solution de front isotherme et correspondant à une iso-ω_F, l'identité (4.56) doit être valable quelles que soient les valeurs des coordonnées y et z. Il en résulte la condition de proportionnalité :

$$g(y,z) \propto \frac{1}{1+\frac{y^2}{(\omega_F+L_1)^2}+\frac{z^2}{(\omega_F+L_2)^2}} \tag{4.57}$$

Ainsi, le profil de réactivité $g(\mathbf{x})$ se trouve encore être de forme Lorentzienne. Ce choix impose par ailleurs la valeur de ω_F à laquelle est associée l'isotherme du front :

$$\omega_F = 0 \tag{4.58}$$

$$g_{L,3D} = \frac{1}{1+\frac{y^2}{L_1^2}+\frac{z^2}{L_2^2}} \tag{4.59}$$

Les paramètres L_1 et L_2 représentent les largeurs caractéristiques (en unités l_T) du profil de réactivité dans les directions y et z, donc du canal au travers duquel la propagation d'une flamme est étudiée.

Si l'on revisite l'identité (4.56) compte-tenu de (4.58) et (4.59), on obtient une première relation entre la célérité de la flamme U et la température du front θ_F :

$$\theta_F = \frac{U\sqrt{L_1 L_2}}{2} \int_0^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2} d\lambda}{\sqrt{(\lambda + L_1)(\lambda + L_2)}} \tag{4.60}$$

laquelle se réduit bien à (4.29) pour $L_2 \to +\infty$ (poser $\lambda/2 = \xi - \xi_F$).

Cette dernière relation s'écrit plus généralement :

$$\theta = \frac{U\sqrt{L_1 L_2}}{2} \int_\omega^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda/2} d\lambda}{\sqrt{(\lambda + L_1)(\lambda + L_2)}} \tag{4.61}$$

$$\theta_F = \theta(\omega_F) \tag{4.62}$$

4.4.3 Exploitation de la solution obtenue

Il existe donc, même à trois dimensions, une solution du modèle à fonction-δ présentant un front parabolique isotherme. Elle est définie par l'ensemble de relations (4.58) (4.61) (4.62) et (4.28), qui est encore valable.

Le front, qui est l'isotherme $\theta = \theta_F$, est donc un paraboloïde elliptique, dont on trouve une représentation sur la figure ci-dessous. Dans le cas d'un profil de réactivité axisymétrique où $L_1 = L_2 = L$ et en introduisant de nouveau le nombre de Peclet $P = UL$, on peut réécrire θ sous la forme :

$$\theta = \int_{U\omega/2}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} d\lambda}{1 + \frac{2\lambda}{P}} \tag{4.63}$$

Partant d'une valeur donnée de P on calcule aisément θ_F puis U et enfin L, de la même manière que dans le cas bidimensionnel. La courbe de réponse statique correspondante apparait figure 4.8

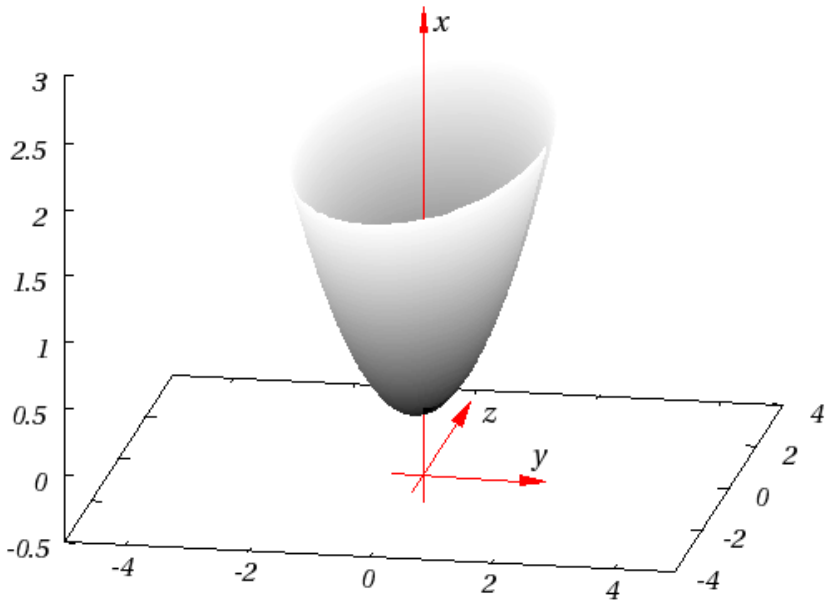


Figure 4.6 – Isotherme paraboloïdale pour une solution 3D du modèle à fonction-δ

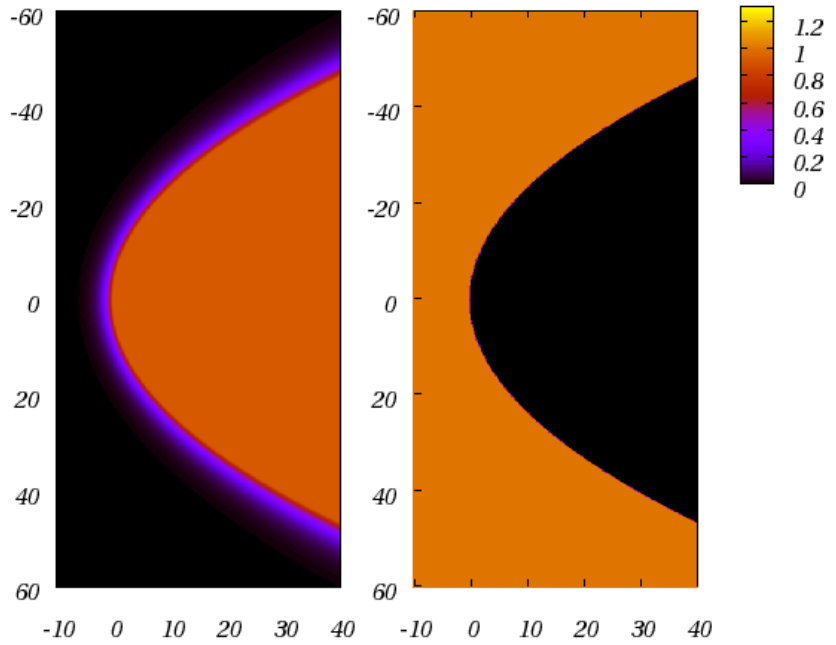


Figure 4.7 – Champs de température (à gauche) et de fraction massique en réactif (à droite) solutions du modèle à fonction-δ pour $n = 5$ et $L = 20$ en 3D-axisymétrique.

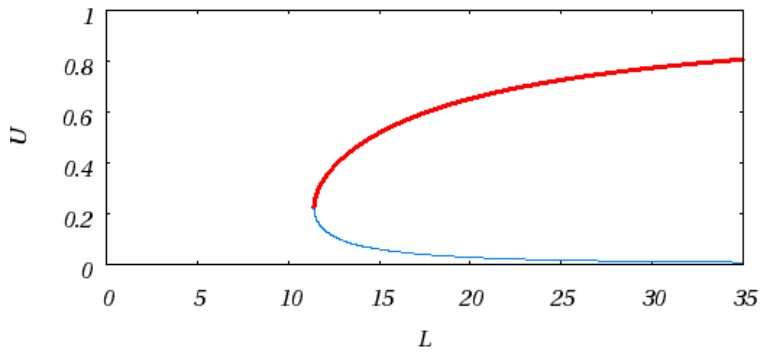


Figure 4.8 – Courbe de réponse statique pour la solution 3D axisymétrique du modèle à fonction-δ (avec $n = 5$).

4.5 Conclusion

L'approche asymptotique d'une flamme en milieu solide stratifié et bidimensionnel laisse présumer que des solutions de front parabolique (au premier ordre en $1/\beta$) existent, et que ce front est isotherme aux deux premiers ordres.

Ce chapitre montre qu'une telle flamme peut apparaître en tant que solution *exacte* d'un modèle à fonction-δ et être généralisée au cas tridimensionnel (ainsi qu'aux flammes se propageant dans un milieu à $Le < +\infty$, voir Annexe B). Le fait de pouvoir expliciter des solutions exactes (et pour tout n) semble tout à fait exceptionnel, pour un tel problème non-linéaire à frontière libre.

Ces solutions correspondent à un profil transversal de réactivité Lorentzien. Le front est par construction isotherme et toutes les isothermes sont, selon la dimension de l'espace, ou bien des paraboloïdes elliptiques ou bien des paraboles.

Conformément à ce que l'approche asymptotique permettait d'anticiper, l'existence de ces solutions est assujettie à une condition portant sur la largeur caractéristique L du canal réactif : L doit être supérieure à une certaine valeur critique L_Q d'autant plus élevée que n l'est (comme le prévoit l'étude à la limite $\beta \to +\infty$), ce que montrent clairement les courbes d'extinction établies.

Ce modèle vient donc affermir les conclusions préssenties lors du précédent chapitre : pour qu'une flamme survive dans le milieu stratifié, la largeur caractéristique du canal dans lequel elle se propage doit être suffisamment importante.

Une étude numérique présentée au cours d'un chapitre ultérieur permet d'achever la validation de ces modèles et d'en évaluer la précision.

Chapitre 5

Stabilité d'un front plan bidimensionnel

Sommaire

5.1 Introduction 52

5.2 Établissement de la relation de dispersion . . . 52

5.2.1 Le modèle utilisé 53

5.2.2 Recherche des perturbations harmoniques satisfaisant le problème linéarisé 54

5.3 Étude de la relation de dispersion 57

5.3.1 Recherche de la frontière du domaine de stabilité 57

5.3.2 Courbes $\omega_r = \omega_r(k)$ et $\omega_i = \omega_i(k)$ 58

5.4 Quelques observations numériques sur l'instabilité de la flamme plane 62

5.4.1 Méthode utilisée 62

5.4.2 Frontière de stabilité dans le plan $n - k$ 65

5.4.3 Quelques remarques sur la forme de l'instabilité 66

5.5 Synthèse et conclusion 67

5.1 Introduction

Les flammes sont un phénomène propice à l'apparition d'instabilités, qui peuvent être de natures diverses : hydrodynamique (Landau-Darrieus), thermo-diffusive, ou résulter par exemple de l'effet de la gravité (Rayleigh-Taylor).

Le problème d'une flamme se propageant dans un milieu solide (stratifié ou non) tel qu'abordé dans le cadre de ce mémoire autorise l'apparition d'une instabilité que l'on peut dire thermique-chimique par parenté avec l'instabilité thermo-diffusive des flammes en milieu gazeux. On présente ici une étude de la stabilité linéaire d'une flamme plane adiabatique évoluant en milieu homogène [30]. Bien que restreinte à un front plan, cette étude permet de rappeler quelques valeurs notables du paramètre clé pour la stabilité qu'est β, c'est à dire la sensibilité du terme de production à la température de la zone réactive. Ce chapitre permet par ailleurs de se familiariser avec la forme que présente l'instabilité du front courbe, laquelle est autrement plus délicate à étudier d'un point de vue formel.

5.2 Établissement de la relation de dispersion

On mène ici une étude de la stabilité *linéaire* du front plan suivant la méthode de décomposition en modes normaux.

On s'intéresse pour cela à l'évolution de perturbations de faible amplitude (devant leur longueur d'onde) imposées à la forme du front, laquelle évolution est décrite par un modèle à fonction-δ dont les équations sont linéarisées autour de la solution plane stationnaire. Le problème une fois linéarisé, les perturbations harmoniques ϕ que l'on introduit évoluent de manières indépendantes. Ces harmoniques sont de faible amplitude ("petites perturbations") ϵ, de nombre d'onde k réel, avec un taux de croissance *a priori* complexe $\omega = \omega_r + i\omega_i$:

$$\phi = \epsilon \cdot \exp\left(\omega\tau + ikz\right).$$

L'existence d'une solution au problème linéarisé, lorsqu'une perturbation de nombre d'onde k est introduite, est soumise à une condition exprimée sous la

forme d'une relation $\mathcal{D}(k,\omega) = 0$ entre k et le taux de croissance ω, appelée relation de dispersion. C'est elle que l'on recherche à présent.

5.2.1 Le modèle utilisé

On considère les équations (2.15-2.16) que l'on réécrit dans un référentiel attaché au front. On introduit pour cela le changement de coordonnées suivant, où ξ_F désigne la position du front et S_L la vitesse de la flamme plane stationnaire adiabatique :

$$\varkappa = \xi - \xi_F = \xi - [-S_L\,\tau + \phi(\zeta,\tau)] \tag{5.1}$$

$$\zeta = \eta \tag{5.2}$$

$$t = \tau \tag{5.3}$$

en conséquence de quoi les équations instationnaires prennent la forme :

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} + (1-\phi_t)\frac{\partial\theta}{\partial\zeta} = \tilde{\Delta}\theta + w(a,\theta) \tag{5.4}$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + (1-\phi_t)\frac{\partial a}{\partial\zeta} = \quad -w(a,\theta) \tag{5.5}$$

où le Laplacien se décline suivant

$$\tilde{\Delta}\cdot = \frac{\partial^2\cdot}{\partial\varkappa^2} + \frac{\partial\cdot}{\partial\zeta}\left(\frac{\partial\cdot}{\partial\zeta} - \phi_\zeta\frac{\partial\cdot}{\partial\varkappa}\right) - \phi_\zeta\frac{\partial\cdot}{\partial\varkappa}\left(\frac{\partial\cdot}{\partial\zeta} - \phi_\zeta\frac{\partial\cdot}{\partial\varkappa}\right) \tag{5.6}$$

Dans le cadre d'un modèle à fonction-δ, le problème est ramené à une équation unique décrivant le champ de température de part et d'autre du front :

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} + (1-\phi_t)\frac{\partial\theta}{\partial\varkappa} = \tilde{\Delta}\theta, \quad \forall\varkappa \neq 0 \tag{5.7}$$

complétée par une relation supplémentaire issue de l'équation pour a :

$$(1-\phi_t) = W \tag{5.8}$$

La solution est en outre soumise à deux relations de saut à travers le front. On peut montrer qu'il s'agit des mêmes relations de saut que celles introduites au cours du chapitre précédent dans lesquelles le profil de réactivité $g(z)$ est uniforme et unitaire et où le terme U s'écrit à présent $(1-\phi_t)$. En effet,

ces relations demeurent valables aussi longtemps que la flamme considérée est quasi-statique et localement plane. Elles s'écrivent donc :

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}\theta]\!] = -W/\sqrt{1+\phi_\zeta^2} \tag{5.9}$$

$$[\![\theta]\!] = 0 \tag{5.10}$$

où W s'écrit :

$$W = Q\sqrt{1+\phi_\zeta^2} \tag{5.11}$$

si l'on note

$$Q = \sqrt{\frac{F(\theta_F)}{F(1)}} \tag{5.12}$$

Par continuité de θ au travers du front, imposée par (5.10), la valeur θ_F n'est autre que $\theta(0)$. On rappelle par ailleurs que $F(\theta) = \int_0^\theta f(T)dT$.

La solution stationnaire de ce système - celle dont on souhaite étudier la stabilité - s'obtient facilement dès que l'on recherche une solution telle que $\phi \equiv cte$ et qui vérifie la condition aux limites $\theta(-\infty) = 0$. Cette solution, dite de base, s'écrit :

$$\bar{\theta}(\varkappa \leq 0) = \exp(\varkappa) \tag{5.13}$$

$$\bar{\theta}(\varkappa > 0) = 1 \tag{5.14}$$

$$\bar{\phi} = 0 \tag{5.15}$$

5.2.2 Recherche des perturbations harmoniques satisfaisant le problème linéarisé

L'étude de stabilité menée ici se limite à la stabilité linéaire : seul le comportement du front plan vis-à-vis de perturbations d'amplitude infinitésimale est considéré. Dans ce cadre, on peut linéariser les équations du problème autour de la solution stationnaire (de base) et se limiter au premier ordre en l'amplitude ϵ des perturbations harmoniques envisagées. On considère donc des solutions s'écrivant sous la forme :

$$\theta(\varkappa, \zeta, t) = \bar{\theta}(\varkappa) + \phi \cdot \hat{\theta}(\varkappa)$$

La linéarisation de Q fait intervenir le rapport $f(1)/F(1)$. Les fonctionnelles de θ que sont f et F s'expriment de manière générale en fonction d'un paramètre de raideur, que l'on a désigné par n pour l'expression (2.26) de $f_n(\theta)$ et par β pour l'expression (2.14) de $f(\theta)$ issue directement de la loi d'Arrhenius. Dans ce dernier cas, le rapport $f(1)/F(1)$ vaut β ; on introduit alors un paramètre β_{eff} représentant la valeur effective de β correspondant à la valeur du rapport $f(1)/F(1)$ mise en jeu pour une fonctionnelle $f(\theta)$ autre.

$$\beta_{eff} = \frac{f(1)}{F(1)} \tag{5.16}$$

On peut montrer[11] par ailleurs que n vérifie :

$$\beta_{eff} = \frac{n}{F_n(1)} \simeq n + \frac{\pi^2}{6} \tag{5.17}$$

Le problème linéarisé se décline alors suivant les équations suivantes, avec pour inconnues les fonctions $\hat{\theta}(\varkappa)$.

$$\hat{\theta}_{\varkappa\varkappa} - \hat{\theta}_{\varkappa} - (\omega + k^2)\hat{\theta} = -(\omega + k^2)\bar{\theta}_{\varkappa} \tag{5.18}$$

$$\hat{\theta}_{\varkappa}(0^+) - \hat{\theta}_{\varkappa}(0^-) = \frac{\hat{\theta}(0)}{2}\frac{f(1)}{F(1)} \tag{5.19}$$

$$\omega = -\frac{\hat{\theta}(0)}{2}\frac{f(1)}{F(1)} \tag{5.20}$$

$$\hat{\theta}(0^+) = \hat{\theta}(0^-) = \hat{\theta}(0) \tag{5.21}$$

Les solutions de (5.18) sont de la forme :

$$\hat{\theta}(\varkappa < 0) = A^- e^{C^+\varkappa} + B^- e^{C^-\varkappa} + e^{\varkappa} \tag{5.22}$$

$$\hat{\theta}(\varkappa > 0) = A^+ e^{C^+\varkappa} + B^+ e^{C^-\varkappa} \tag{5.23}$$

[11] Il s'agit de calculer l'intégrale $F_n(1)$, ce qui peut se faire par développement en série du terme $(1-x^n)/(1-x^{n+1})$ puis permutation de la somme et de l'intégrale. On trouve ainsi $1/\beta_{eff}(n) = \sum_{m=1}^{+\infty} 1/\left((m+1)(m+1+nm)\right)$, ce qui peut s'écrire $1/\beta_{eff}(n) = \left(\psi(1) - \psi(1/(n+1))\right)/n - 1$ en utilisant la fonction digamma $\psi(z) = d\log\Gamma(z)/dz$. En particulier, $\beta_{eff}(0) = 6/(\pi^2 - 6)$ et $\beta_{eff}(n \gg 1) \simeq n + \pi^2/6$. Le hasard veut que les deux nombres impliqués soient numériquement proches, si bien que β_{eff} varie quasi-linéairement avec n, ce que montre un calcul numérique.

Les constantes C^+ et C^- sont les racines complexes de l'équation caractéristique associée à (5.18). En notant

$$\Gamma_0 = \sqrt{\Delta},\ Re(\Gamma_0) \geqslant 0 \tag{5.24}$$

la racine carrée du discriminant $\Delta = 1 + 4(\omega + k^2)$ avec pour détermination de la racine carrée celle valant $+1$ lorsque $\omega + k^2 = 0$, ces racines s'expriment selon :

$$C^+ = \frac{1}{2}(1 - \Gamma_0) \tag{5.25}$$

$$C^- = \frac{1}{2}(1 + \Gamma_0) \tag{5.26}$$

Par ailleurs, on étudie ici l'évolution de perturbations spontanées du système, ce qui implique l'inexistence de telles perturbations à l'infini du milieu frais. Les perturbations étudiées étant de faible amplitude, la perturbation doit de plus être partout d'amplitude finie. Ces deux conditions s'écrivent :

$$\hat{\theta}(-\infty) = 0 \tag{5.27}$$

$$|\hat{\theta}(+\infty)| < +\infty \tag{5.28}$$

Ceci conduit conduit à l'hypothèse supplémentaire[12] suivante sur le signe de C^+ :

$$Re(C^+) \leq 0 \tag{5.29}$$

qui se traduit par la condition :

$$Re(\Gamma_0) \geq 1 \tag{5.30}$$

Étant donné par ailleurs que $Re(C^-) \geq 0$, les relations (5.22) et (5.23) conduisent à la solution :

$$\hat{\theta}(\varkappa < 0) = [\hat{\theta}(0) - 1]\ e^{C^-\varkappa} + e^{\varkappa} \tag{5.31}$$

$$\hat{\theta}(\varkappa > 0) = \hat{\theta}(0)\ e^{C^+\varkappa} \tag{5.32}$$

[12] Cette hypothèse ne retire rien à la conclusion de l'étude. On peut en effet montrer que les solutions écartées ne peuvent être valables qu'à la condition $Re(\omega) \leq 0$, c'est-à-dire que l'hypothèse effectuée conserve tous les cas d'instabilité, y compris les cas marginaux.

Finalement, en introduisant les expressions (5.31) et (5.32) dans la condition de saut (5.21), on obtient :

$$\hat{\theta}(0)\Gamma_0 = -\omega - \frac{1}{2}(1 - \Gamma_0) \tag{5.33}$$

qui, conjuguée avec (5.20), fournit la relation de dispersion recherchée :

$$\sqrt{1 + 4(\omega + k^2)}\,(1 + 4\omega\beta_{eff}) = (1 + 2\omega) \tag{5.34}$$

5.3 Étude de la relation de dispersion

L'étude de la stabilité de la solution de base consiste en la détermination des valeurs de la pulsation $\omega = \omega(k)$ pour lesquelles existe une solution non triviale au problème (5.18-5.21). Parmi les fréquences retenues – c'est-à-dire vérifiant la relation de dispersion – celles de partie réelle nulle caractérisent les perturbations neutres (non atténuées ni amplifiées par le front) vis-à-vis de l'instabilité. Elles constituent, dans le plan (β_{eff}-k), la frontière séparant les domaines de stabilité et d'instabilité. C'est cette frontière que l'on commence par rechercher. Ensuite, il est intéressant d'observer et de caractériser le comportement de chaque longueur d'onde, ce qui équivaut à la détermination du taux de croissance et de la pulsation associés à chaque perturbation harmonique de longueur d'onde k.

Afin de déterminer ces résultats, on forme le carré

$$\left[1 + 4(\omega + k^2)\right]\,(1 + 4\omega\beta_{eff})^2 = (1 + 2\omega)^2 \tag{5.35}$$

de la relation de dispersion. Cette opération ajoute des racines parasites qu'il sera nécessaire de filtrer ultérieurement, grâce à la condition (5.34) qui vient s'ajouter à (5.30).

5.3.1 Recherche de la frontière du domaine de stabilité

Lorsqu'on se situe sur la frontière du domaine de stabilité, le taux de croissance ω_r des perturbations est nul : $\omega = \equiv i\Omega$. Compte tenu de ceci dans la

relation de dispersion élevée au carré (5.35) et en séparant parties réelles et parties imaginaires, on obtient le système :

$$-16\Omega^3\beta_{eff}^2 + 2\Omega\beta_{eff}(1+4k^2) = 0 \tag{5.36}$$

$$(\Omega^2 + k^2) - 8\Omega^2\beta_{eff} - 4\Omega^2\beta_{eff}^2(1+4k^2) = 0 \tag{5.37}$$

Si l'on écarte le cas $\Omega = 0$ (qui ne peut être vérifié hors de la solution triviale $k = 0$), la première relation (5.36) conduit à l'expression de Ω^2 qui, reportée dans (5.37), fournit l'équation suivante pour la frontière de stabilité $\beta_{eff}(k)$:

$$\beta_{eff} = 4\frac{1+3k^2}{1+4k^2} + \frac{\sqrt{\Delta}}{2} \tag{5.38}$$

Cette équation du second degré a un discriminant positif. Elle admet deux solutions réelles dont une seule est positive, comme doit l'être la solution β_{eff} recherchée. L'expression de la frontière de stabilité dans le plan β_{eff}-k se décline donc sous la forme (5.39), que l'on a représentée figure 5.1.

$$\beta_{eff} = 4\frac{1+3k^2}{1+4k^2}\left[1 + \sqrt{1 + \frac{(1+4k^2)^3}{4(1+3k^2)^2}}\right] \tag{5.39}$$

Elle montre, outre l'existence de l'instabilité du mode plan à partir de la valeur critique $4+2\sqrt{5}$ pour β_{eff}, l'apparition de modes instables dès la valeur 8.

$$\beta_{eff,crit}^{1D} = 4 + 2\sqrt{5} \simeq 8.47 \tag{5.40}$$

$$\beta_{eff,crit}^{2D} = 8 \tag{5.41}$$

L'unique mode amplifié lorsque β_{eff} atteint la valeur 8 et qu'apparaît pour la première fois l'instabilité a pour nombre d'onde et pour pulsation :

$$k_{crit} = 1/2 \tag{5.42}$$

$$\Omega_{crit} = \sqrt{2} \tag{5.43}$$

5.3.2 Courbes $\omega_r = \omega_r(k)$ et $\omega_i = \omega_i(k)$

Le carré de la relation de dispersion, ordonné selon les puissances de ω, s'écrit :

$$a\omega^3 + b\omega^2 + c\omega + d = 0 \tag{5.44}$$

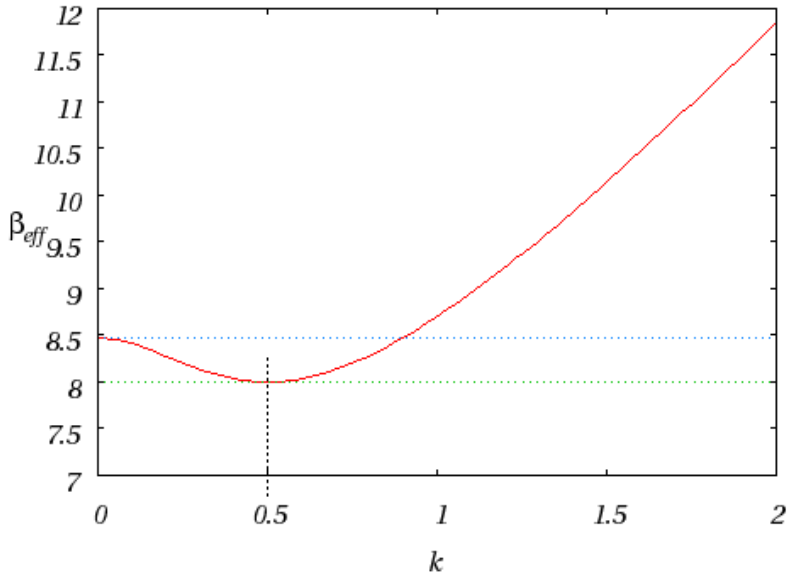


Figure 5.1 – Frontière de stabilité linéaire de la flamme plane adiabatique bidimensionnelle. Pour les grandes valeurs de k, cette frontière admet une asymptote d'équation $\beta = 3 + 4k$.

avec pour coefficients :

$$a = 16 \tag{5.45a}$$

$$b = -\beta_{eff}^2 + 8\,\beta_{eff} + 4(1 + 4k^2) \tag{5.45b}$$

$$c = 2\,\beta_{eff}\,(1 + 4k^2) \tag{5.45c}$$

$$d = \beta_{eff}^2\,k^2 \tag{5.45d}$$

Par la méthode de Cardan, il est aisé de déterminer analytiquement l'expression des solutions recherchées. Ces solutions ont été déterminées numériquement et représentées (après filtrage par la condition $Re(\Gamma_0) \leq 1$ et la relation (5.34)) sur les figures 5.2 à 5.3.

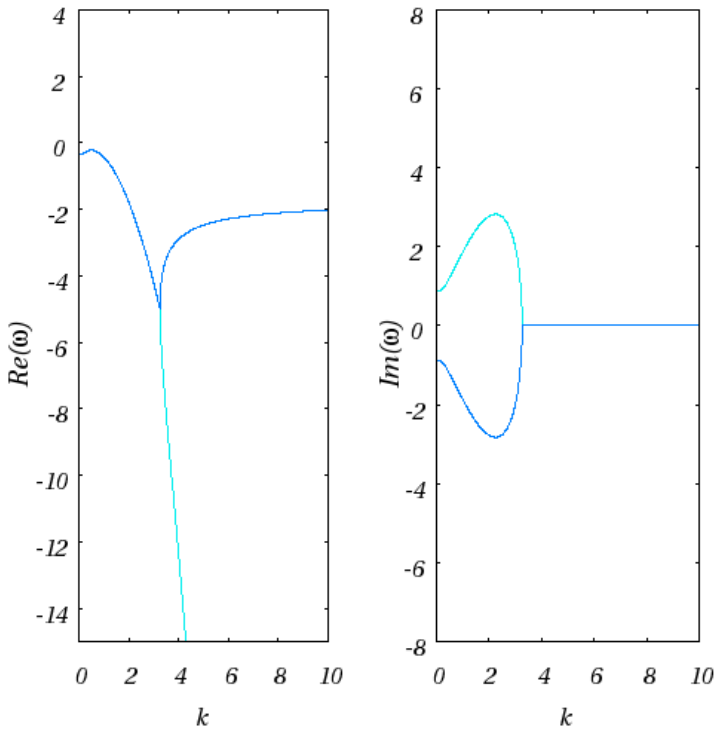


Figure 5.2 – Évolution du taux de croissance ($Re(\omega)$) et de la pulsation ($Im(\omega)$) des différent modes pour $\beta_{eff} = 7$.

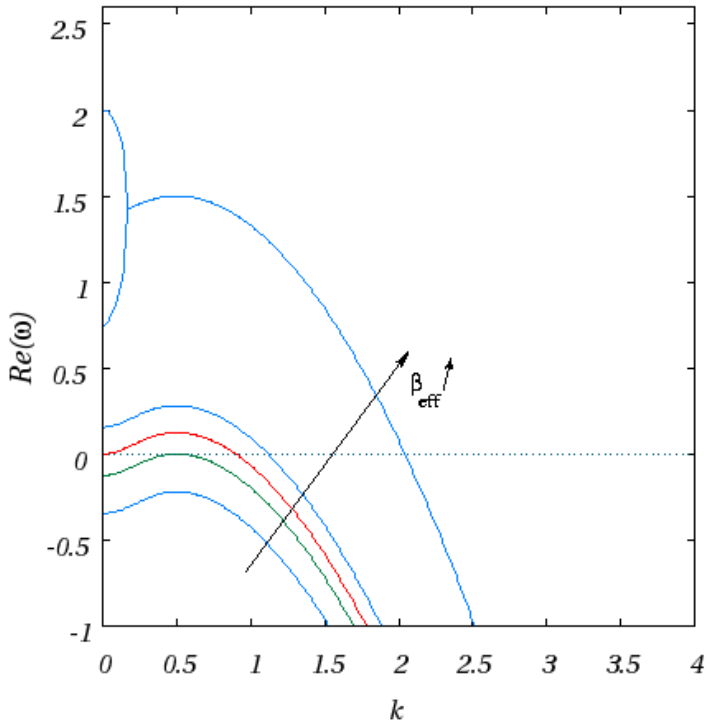


Figure 5.3 – Taux de croissance tracés - de bas en haut - pour $\beta_{eff} = 7, 8, 4 + 2\sqrt{5}, 9, 12$.

5.4 Quelques observations numériques sur l'instabilité de la flamme plane

On présente ici quelques résultats concernant l'approche numérique du problème *non linéaire* de la flamme plane bidimensionnelle.

5.4.1 Méthode utilisée

Diverses méthodes numériques ont été envisagées et "manipulées" pour mener à bien l'étude numérique des flammes courbes (qui fait l'objet du prochain chapitre). C'est le cas notamment de méthodes spectrales et pseudospectrales [8] qui, si elles n'ont pas été retenues pour les flammes courbes, sont bien adaptées à la simulation de flammes planes en moyenne (qu'il est plus facile de périodifier).

La méthode utilisée est une méthode de type Spectrale Fourier en espace. Au lieu de résoudre une équation différentielle en temps pour les valeurs $\theta_{i,j}$ et $a_{i,j}$ des champs aux nœuds (i,j) du maillage du domaine de calcul, ce sont les équations vérifiées par les éléments $\widetilde{\theta}_{k_x,k_y}$ et $\widetilde{a}_{k_x,k_y}$ du spectre de Fourier des champs θ et a qui sont résolues. La solution dans l'espace physique est ensuite obtenue par reconstitution à partir de son spectre (au moyen d'une FFT bidimensionnelle).

L'utilisation d'une décomposition spectrale en modes de Fourier est appropriée lorsque la solution recherchée est à la fois périodique et suffisamment régulière, sinon la solution reconstituée est déformée par phénomène de Gibbs au niveau des discontinuités qu'elle tend à présenter. Dans le cas d'une flamme plane, les profils de θ et de a sont asymptotiquement des constantes aux bords[13] "frais" et "brûlé" du domaine, si bien qu'il est possible de "périodifier" [10] le problème suivant la direction de propagation x. Suivant l'autre direction, la périodicité est imposée en tant que conditions aux limites.

Les équations sur lesquelles on appuie cette partie numérique sont celles (2.17-2.18) exprimées dans un repère mobile, décrivant ainsi une flamme "souf-

[13] On considère les bords du domaine suffisamment "loins" de la zone réactive pour être assimilables, du point de vue de la flamme (i.e. relativement à l_T), à l'infini.

flée" par un champ de vitesse U. On considère le domaine $\mathcal{D} = \{(x,z) \in [-x_m, x_m] \times [0, z_m]\}$ et on introduit des coordonnées X, Z telles que (x,z) décrit $\mathcal{D}$ lorsque (X,Z) décrit $[0,\pi] \times [0,\pi]$:

$$x = a_{mx}\, X + b_{mx} \tag{5.46}$$

$$z = a_{mz}\, Z + b_{mz} \tag{5.47}$$

Les conditions aux limites suivant x sont[14] des conditions de Dirichlet :

$$\theta(-x_m) = 1 - \theta(+x_m) = 0 \tag{5.48}$$

$$a(-x_m) = 1 - \theta(+x_m) = 1 \tag{5.49}$$

Il est pratique alors de se ramener à des conditions homogènes par changement d'inconnues u, v :

$$\theta(x,z) = \mathcal{T}(x) + u(x,z) \tag{5.50}$$

$$a(x,z) = C(x) + v(x,z) \tag{5.51}$$

où T et C sont définies [10] par :

$$\mathcal{T}(x) = \frac{1}{2}\left(1 + \tanh[p(x)]\right) \tag{5.52}$$

$$C(x) = 1 - \mathcal{T}(x) \tag{5.53}$$

$$p(x) = A \cdot \tan\left[\frac{\gamma(x) - \pi}{2}\right] \tag{5.54}$$

$$\gamma(x) = \frac{\pi(x + x_m)}{x_m} \tag{5.55}$$

et où A est un paramètre constant permettant de jouer sur la raideur du saut qu'effectuent les fonctions $\mathcal{T}(x)$ et $C(x)$. On utilise lors des simulations la valeur $A = 10$, pour laquelle $\mathcal{T}(x)$ est proche de $\bar{\theta}(x)$.

Les conditions aux limites selon X imposées à u, v sont alors :

$$u(X = 0) = u(X = \pi) = 0 \tag{5.56}$$

$$v(X = 0) = v(X = \pi) = 0 \tag{5.57}$$

[14] On considère un domaine de calcul suffisamment large pour que des conditions de Dirichlet soient applicables.

Les équations (2.17)-(2.18) à résoudre s'écrivent quant à elles :

$$u_t + \frac{1}{a_{mx}^2} u_{XX} + \frac{1}{a_{mz}^2} u_{ZZ} = \mathcal{T}_{xx} - U\left[\mathcal{T}_x + \frac{1}{a_{mx}} u_X\right] + w \tag{5.58}$$

$$v_t = -U\left[C_x + \frac{1}{a_{mx}} v_X\right] - w \tag{5.59}$$

Les fonctions $\mathcal{T}$, C, u, v sont 2π-périodiques en X et Z en tant que restrictions de prolongements périodiques. Il est pratique de considérer que u et v sont *impaires* en X car ces inconnues peuvent alors être directement recherchées sous la forme mixte :

$$U_{ij} = u(X_i, Z_j) = \sum_{k_x,k_z} \widetilde{U}_{k_x k_z}\, 2\epsilon^-_{k_z} \sin(k_x X_i)\cos(k_z Z_j) \tag{5.60}$$

$$V_{ij} = v(X_i, Z_j) = \sum_{k_x,k_z} \widetilde{V}_{k_x k_z}\, 2\epsilon^-_{k_z} \sin(k_x X_i)\cos(k_z Z_j) \tag{5.61}$$

où (Xi, Z_j) désignent les nœuds[15] du maillage ; $\widetilde{U}_{k_x k_z}, \widetilde{V}_{k_x k_z}$ sont les éléments des spectres de Fourier de u et v (on désigne de même par $\widetilde{F}_{k_x,k_y}$ les éléments du spectre de toute fonction 2π-périodique $f(X,Z)$) ; et les facteurs 2 et $\epsilon^-_{k_z}$ sont des coefficients propres à la forme mixte DCT/DST[16][15] employée.

On remplace alors les inconnues $U_{i,j}$ et $V_{i,j}$ par les éléments du spectre $\widetilde{U}_{k_x k_z}$ et $\widetilde{V}_{k_x k_z}$.

Les équations (5.58)-(5.59) s'écrivent après transformation de Fourier :

$$\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{U}_{k_x,k_y} = -\left(\frac{k_x^2}{a_{mx}^2} + \frac{k_z^2}{a_{mz}^2}\right)\widetilde{U}_{k_x,k_y} + \widetilde{F(u)}_{k_x,k_y} \tag{5.62}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{V}_{k_x,k_y} = \widetilde{F(v)}_{k_x,k_y} \tag{5.63}$$

où

$$\widetilde{F(u)}_{k_x,k_y} = \widetilde{\mathcal{T}_{xx}}_{k_x,k_y} - U\left[\widetilde{T_x}_{k_x,k_y} + \frac{1}{a_{mx}}\widetilde{u_X}_{k_x,k_y}\right] + \widetilde{W}_{k_x,k_y} \tag{5.64}$$

$$\widetilde{F(v)}_{k_x,k_y} = -U\left[\widetilde{C_x}_{k_x,k_y} + \frac{1}{a_{mx}}\widetilde{v_X}_{k_x,k_y}\right] - \widetilde{W}_{k_x,k_y} \tag{5.65}$$

[15] Lorsqu'on utilise des méthodes spectrales ou pseudo-spectrales, le positionnement des nœuds du maillage est imposé par le choix de la base de fonctions suivant laquelle on décompose les inconnues [6].

[16] Les sigles DCT et DST désignent ici les "Discrete Cosine Transform" et "Discrete Sine Transform" remplaçant la Transformée de Fourier Discrète (DFT) pour les fonctions respectivement paires et impaires.

Les termes en k_x^2 et k_z^2 issus du Laplacien sont traités de manière implicite lors de l'intégration en temps, tandis que les autres termes sont interprétés explicitement.

Reste à déterminer la vitese U, que l'on fixe en imposant [29] au champs a d'être constant en un point (*) de l'axe X et dans la zone réactive. Ceci conduit à l'expression :

$$U = -\frac{\sum_{k_x,k_z} \epsilon_{k_z}^- \sin(k_x X_*) \widetilde{W}_{k_x,k_y}}{\sum_{k_x,k_z} \epsilon_{k_z}^- \sin(k_x X_*) \left(\widetilde{C_x}_{k_x,k_y} + \frac{1}{a_{mx}} \widetilde{v_X}_{k_x,k_y} \right)} \tag{5.66}$$

5.4.2 Frontière de stabilité dans le plan $n - k$

La comparaison de résultats obtenus à partir du problème non linéraire avec la frontière de stabilité présentée figure 5.1 est très limitée. En effet, dans le cadre d'un problème linéaire, les modes k évoluent sans interraction les uns avec les autres. En réalité cependant, les non linéarités des équations introduisent de telles interactions et la perturbation d'un mode linéairement stable pour une valeur donnée de n peut très bien se reporter sur un mode qui lui est instable et, se trouvant ainsi excité, conduit à l'apparition de l'instabilité.

Il est un point de la frontière de stabilité linéaire qui peut cependant être abordé par résolution des équations non linéaires : c'est celui correspondant à l'apparition de l'instabilité du mode $k = 1/2$. Ce mode est en effet le premier à devenir instable lorsque n augmente – c'est à dire, lorsque la raideur du terme de production s'accentue – si bien qu'on n'est pas amené à exciter un autre mode de façon incontrôlée. On trouve numériquement pour la valeur critique de n :

$$n_{crit}(k = 1/2) \simeq 6.59 \tag{5.67}$$

à comparer à la valeur théorique donnée par $8 = \beta_{eff} \simeq n + \pi^2/6$:

$$n_{crit}^{th}(k = 1/2) \simeq 6.35$$

Par ailleurs, lors d'une étude du problème monodimensionnel, on a pu mettre à jour l'apparition de l'instabilité du mode plan ($k = 0$) pour la valeur critique :

$$n_{crit}(k = 0) \simeq 6.98 \tag{5.68}$$

à comparer à la valeur théorique donnée par $4 + \sqrt{20} = \beta_{eff} \simeq n + \pi^2/6$:

$$n_{crit}^{th}(k = 0) \simeq 6.83$$

Dans les deux cas, l'erreur relative est inférieure à 4% : les développements en $1/n$ sont très précis pour les solides [14] et, par chance, les valeurs critiques de β_{eff} sont grandes.

5.4.3 Quelques remarques sur la forme de l'instabilité

En l'absence de perturbation du front plan initial et lorsqu'elle se révèle instable, la flamme telle qu'observée, présente des oscillations. C'est la première observation que l'on peut faire à partir des profils de vitesse $U(t)$, qui prennent typiquement la forme présentée figure 5.5. Plus on s'éloigne de la frontière de stabilité au sein de la zone instable et plus les oscillations se déforment, présentant sur une période un ralentissement lent suivi d'une forte accélération. Ceci se caractérise par la disymétrie des oscillations de vitesse, dont les pics deviennent de plus en plus mince et de plus en plus élevés. On peut voir ainsi apparaitre un facteur supérieur à 7 entre les maxima des profils de vitesse obtenus lorsqu'on passe de $n = 7$ (Fig. 5.4) à $n = 8$ (Fig. 5.6). Pour cette valeur, la flamme se propage par moments jusqu'à 20 fois la vitesse de flamme plane stationnaire S_L. On comprend alors que le code ne parvienne pas à suivre la solution lorsque la valeur de n devient trop élevée (c'est à dire dès $n = 10$). Des comportements plus complexes apparaissent également, comme en témoigne la figure 5.7.

Si l'on observe des séquences montrant le champ de température dans le domaine à différents instants d'une période, on peut observer le plissement du front de flamme et l'évolution des cellules ainsi formées. La figure 5.8 illustrant l'évolution du front à $n = 7$ montre en effet des zones très localement plus chaudes qu'ailleurs et régulièrement distribuées le long du front. Ces "points chauds" commencent par croître dans un mouvement de poussée relativement brusque (étant de température supérieure ils se propagent plus vite) vers le milieu propice qu'est l'épaisseur de préchauffage. Ce sont alors les côtés de ces cellules qui se propagent transversalement à l'intérieur de la couche préchauffée.

La "bosse" s'étale et l'excès de température s'amoindrit, jusqu'à ce que deux cellules se rencontrent et créent ainsi un nouveau point chaud qui à son tour croît brutalement au sein de la couche préchauffée. Lorsque n augmente, les points chauds sont plus marqués et des bourrelets se forment qui se propagent transversalement (Fig. 5.9). L'instabilité peut alors présenter une véritable anarchie de points chauds poussant spontanément en différents points du front, voire les uns sur les autres, conduisant à des profils de célérité présentant un comportement cahotique. Lorsque l'instabilité d'un mode k est favorisée par la condition initiale, un certain ordre semble conservé (Fig. 5.10). On note un raidissement des cellules qui tendent à devenir des créneaux lorsque n augmente encore ($n = 9$).

5.5 Synthèse et conclusion

La flamme plane en milieu solide est soumise à une instabilité thermique-chimique. Cette instabilité apparaît numériquement dès la valeur $n = 6.35$, correspondant à une valeur du nombre de Zel'dovich effectif de $\beta_{eff} = 8.23$, et révèle la sensibilité du système et donc l'importance du paramètre β_{eff} sur le comportement de la flamme.

Elle se manifeste notamment par des oscillations de célérité, un plissement du front d'autant plus raide que n est grand, et l'apparition de points chauds se propageant transversalement le long du front, dans la couche préchauffée.

Ces résultats laissent présager de la complexité des comportements que peut présenter la flamme courbe.

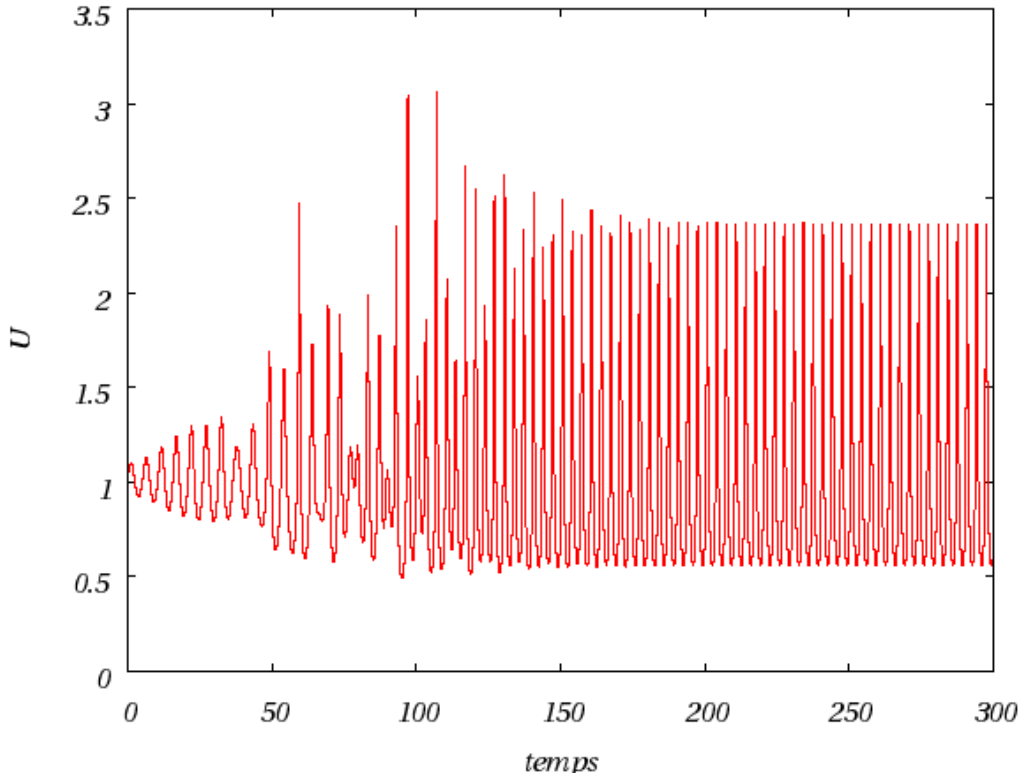


Figure 5.4 – Profil de vitesse U pour $n = 7.0$ et une condition intiale non perturbée. Les oscillations induites par l'instabilité, qui saturent sous l'effet des non-linéarités, présentent un régime périodique de période $T_{RP} \simeq 3.36$ temps de transit.

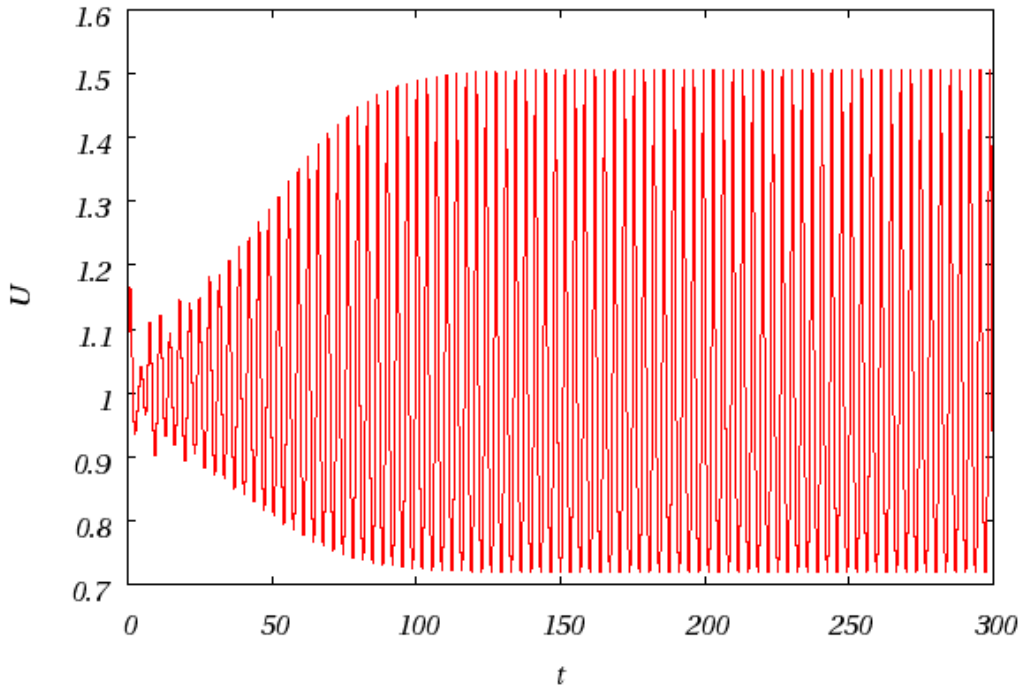


Figure 5.5 – Profil de vitesse U pour $n = 6.7$ et une condition intiale perturbée avec $k = 0.75$

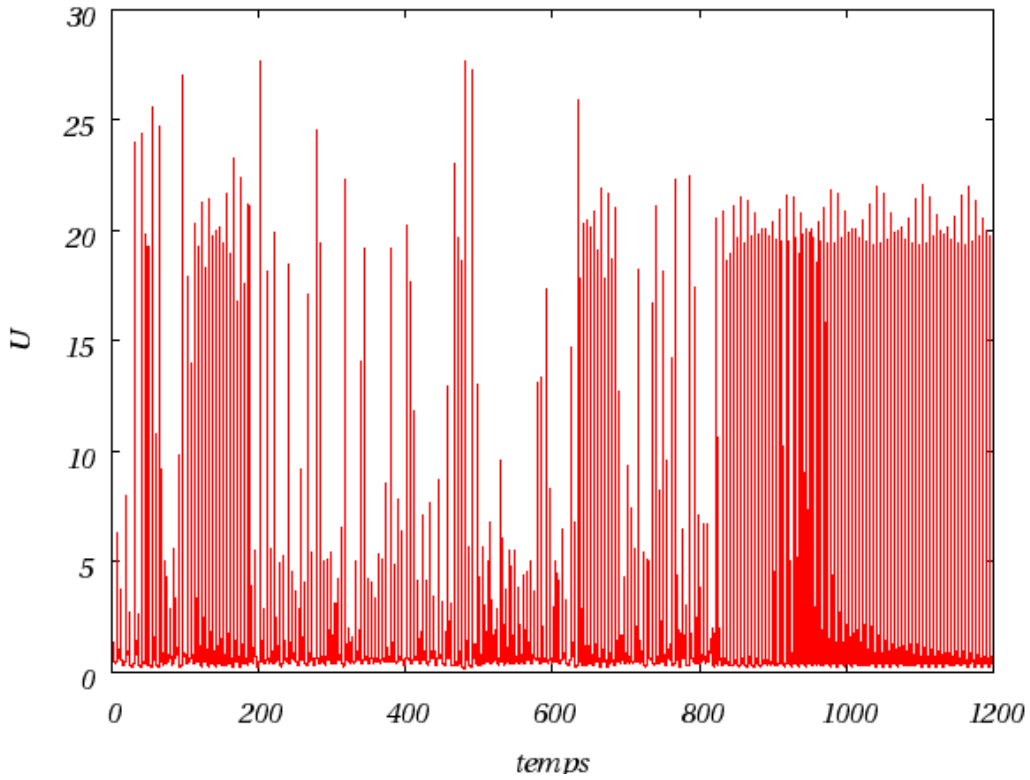


Figure 5.6 – Profil de vitesse U pour $n = 8.0$ et une condition intiale non perturbée.

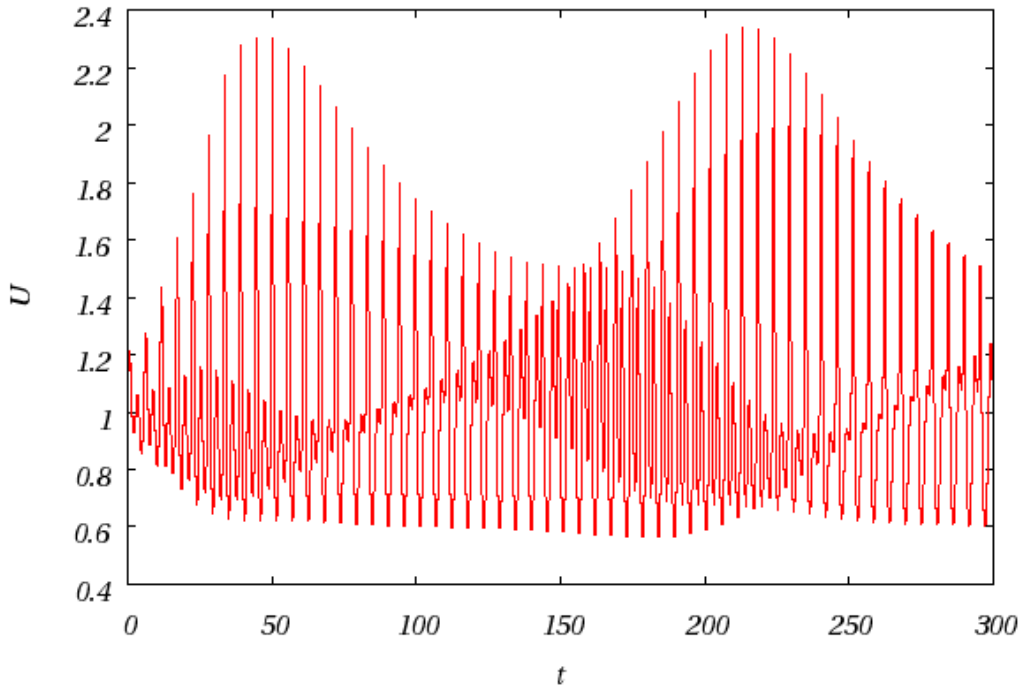


Figure 5.7 – Profil de vitesse U pour $n = 7.0$ et une condition intiale perturbée avec $k = 1.0$

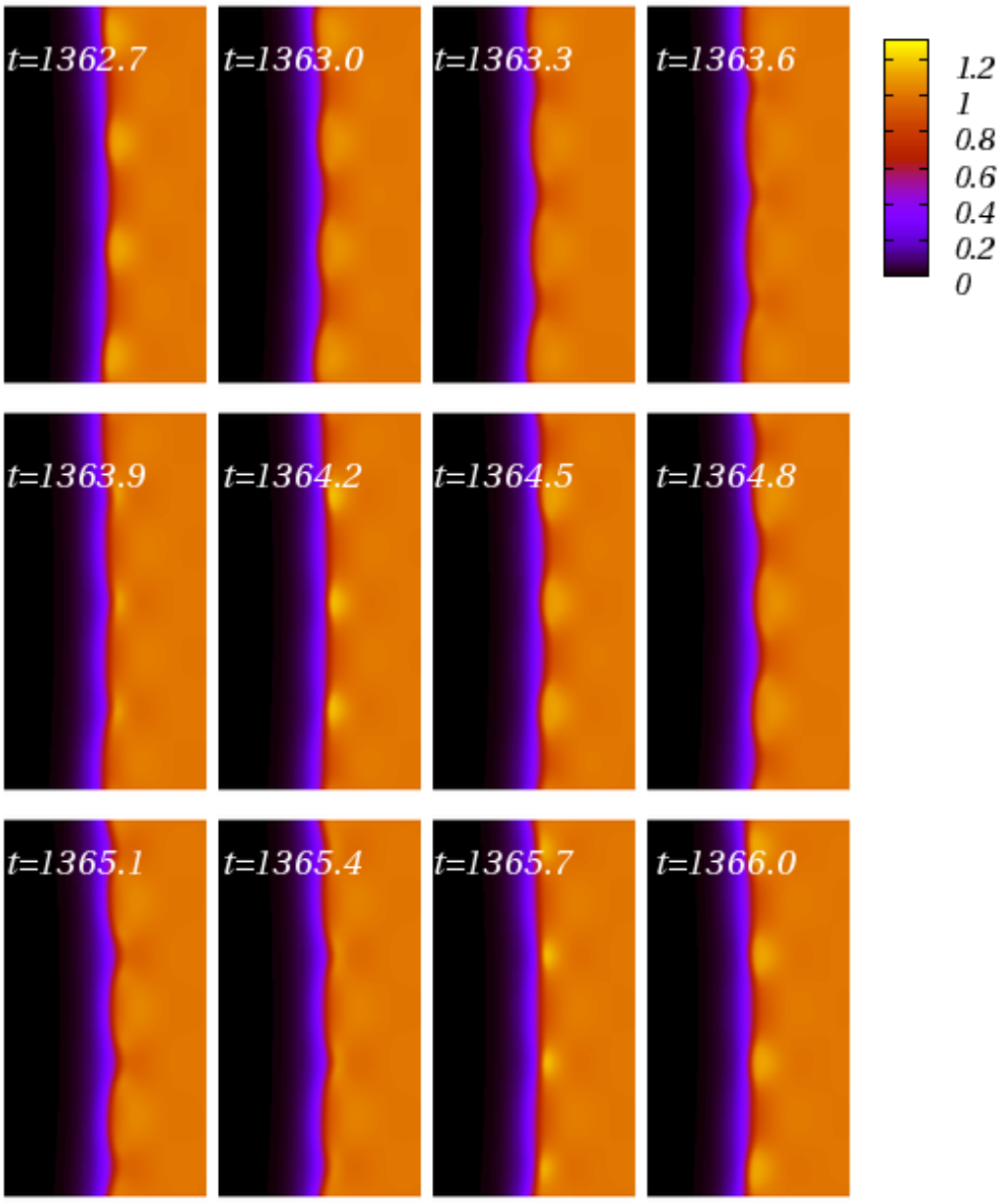


Figure 5.8 – Séquence du champ de θ sur une période pour $n = 7.0$ et une condition intiale non perturbée.

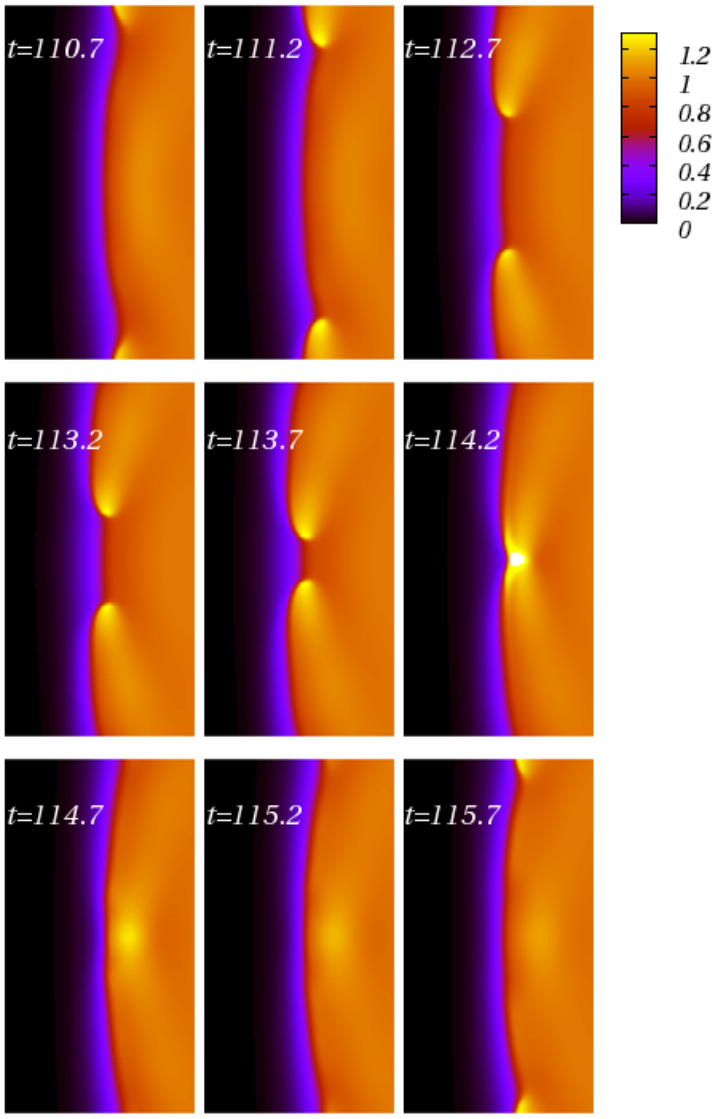


Figure 5.9 – Séquence du champ de θ sur une période pour $n = 8.0$ et une condition intiale non perturbée.

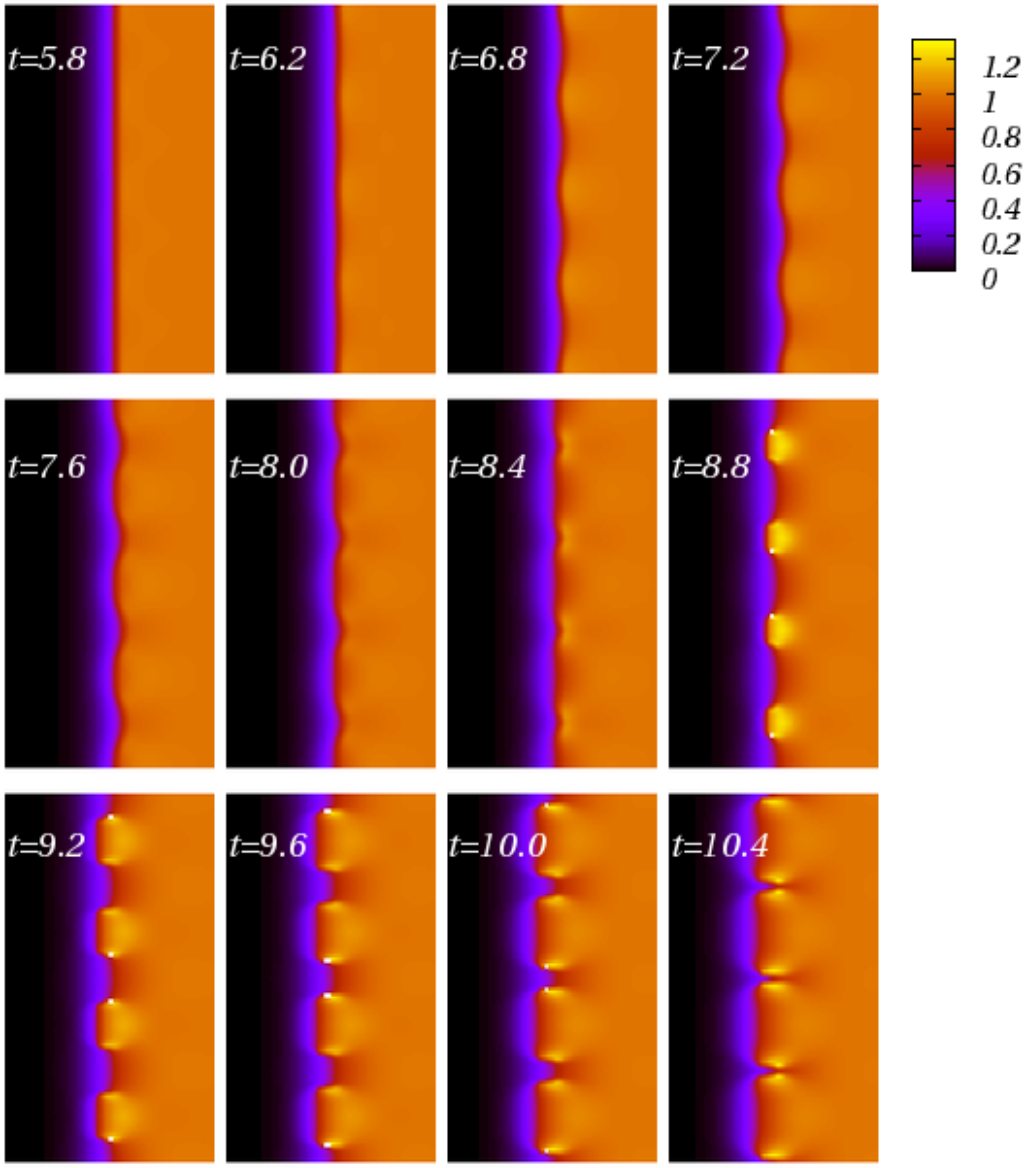


Figure 5.10 – Séquence du champ de θ sur une période pour $n = 9.0$ et une condition intiale perturbée avec $k = 2.0$

Chapitre 6

Étude numérique d'une flamme de canal

Sommaire

6.1 Introduction 76

6.2 Aspects numériques 76

6.2.1 Quelques difficultés posées par la résolution numérique 77

6.2.2 Méthode numérique utilisée 79

6.2.3 Validation et sensibilité des résultats numériques à la finesse du maillage 82

6.3 Simulation de flammes courbes : solutions stationnaires 83

6.3.1 Cas de la flamme parabolique/paraboloïdale . . 83

6.3.2 Comparaison avec d'autres profils de réactivité . 89

6.3.3 Cas de stratification par la composition 94

6.3.4 Conclusion 95

6.4 Quelques observations sur les instabilités 96

6.4.1 Manifestations des instabilités 97

6.4.2 Remise en cause du critère de coincement ? . . . 102

6.5 Conclusion 103

6.1 Introduction

Ce chapitre aborde l'étude numérique de la propagation d'une flamme à travers un canal. Il s'agit, rappelons-le, d'un milieu dont l'inhomogénéité prend la forme d'une stratification de réactivité (et/ou de composition) transversalement à l'axe longitudinal selon lequel la flamme se propage. La réactivité, unitaire et maximale suivant cet axe, décroit avec la distance à ce dernier de façon à devenir rapidement négligeable.

On s'intéresse plus particulièrement au cas où c'est la réactivité qui est variable. Toute autre situation est mentionnée explicitement dans le texte. Le cas nominal de l'étude est celui de la flamme 2D se propageant dans un canal Lorentzien. Lorsque le texte ne fait pas précisément référence à la forme du profil de réactivité $g(z)$, c'est du profil Lorentzien (défini en (4.26)) dont il est question.

Il a été vu précédemment – par le biais des courbes de réponse statique et l'analyse de stabilité du front plan – que l'on peut espérer rencontrer des solutions stationnaires dans certaines régions du plan $n - L$. Ce sont ces solutions, obtenues par simulation numérique directe, que l'on présente ici.

La section qui suit s'attache à évoquer quelques considérations numériques et à présenter la méthode utilisée pour effectuer les simulations. Ensuite, des solutions stationnaires sont présentées pour divers profils de réactivité. Pour finir on s'arrête, le temps d'une section, sur l'existence et la forme des solutions instationnaires observées en cas d'instabilité.

6.2 Aspects numériques

Cette première section traite de la résolution numérique (DNS) des équations générales. On commence par y souligner ce qui rend non triviale cette résolution. Ensuite est décrite la méthode numérique utilisée ; et l'on termine la section par quelques éléments de validation du code.

6.2.1 Quelques difficultés posées par la résolution numérique

Le problème que l'on veut résoudre – une flamme se propageant dans un canal de réactivité – est modélisé par un système de deux équations d'advection-réaction-diffusion. Par soucis de lisibilité elles sont rappelées ici.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + U\frac{\partial \theta}{\partial x} = \Delta\theta + w(a,\theta,y,z) \tag{6.1}$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} + U\frac{\partial a}{\partial x} = \quad - w(a,\theta,y,z) \tag{6.2}$$

L'équation pour θ est du second ordre en espace tandis que la seconde n'est que du premier ordre, du fait de l'absence[17] du terme de diffusion à $Le = +\infty$: les deux équations ne sont donc pas de même nature. La solution attendue présente une région de forts gradients définissant un front courbe se propageant à célérité constante U (lorsqu'elle est stationnaire). En dehors de ce front, les grandeurs évoluent *a priori* "lentement".

Quelles sont les difficultés que ce contexte pose d'un point de vue numérique ?

- **une solution qui se propage** :
  Le fait que la solution recherchée se propage implique i/ soit de considérer un domaine suffisamment grand pour la contenir, engageant ainsi un nombre important de nœuds inutiles ; ii/ soit de recentrer régulièrement sur le front de flamme un domaine de calcul de taille raisonnable (adaptation de maillage dynamique) ; iii/ soit de résoudre le problème dans un repère attaché à la flamme impliquant le calcul de U.
- **une géométrie qui ne privilégie aucune direction spatiale** :
  Le problème fait intervenir une grande disparité d'échelles de temps et d'espace. L'évaluation précise des forts gradients rencontrés au niveau du front requiert d'utiliser un maillage localement très fin. Les variations étant bien plus faibles en dehors du front, un maillage adapté serait approprié. Mais le front est incurvé de façon telle qu'il est difficile de réaliser une adaptation de maillage efficace avec un maillage structuré.

[17] Lorsque $Le < +\infty$ le terme de diffusion de matière s'écrit $(1/Le)\Delta a$.

Résoudre le problème dans des coordonnées paraboliques permettrait l'emploi d'un maillage adapté, mais reporte la compexité géométrique sur l'expression des opérateurs différentiels. Cette méthode tire de plus parti d'une situation très restrictive (front quasi-parabolique).

On est alors contraint d'utiliser un maillage uniformément très fin ($\sim 10^3 \times 10^3$ nœuds). La même difficulté se pose dans la direction temporelle, si l'on anticipe sur l'étude de la flamme instationnaire, laquelle présente des évolutions importantes sur des échelles de temps brèves, suivant un régime parfois long à s'établir.

Une alternative à ces difficultés est l'emploi d'un maillage non structuré. La résolution du problème au moyen d'un code avec adaptation du raffinement du maillage (AMR) aussi bien en espace qu'en temps est en cours, s'appuyant sur la librairie PARAMESH[35]. Le principe est d'utiliser non plus une grille unique avec un maillage structuré mais une superposition de telles grilles (suivant une arborescence complexe) utilisant toutes un maillage structuré, identique à un facteur d'échelle près, ce qui permet l'emploi d'un *solver* unique.

- **un temps de calcul important** :

  La stabilité du schéma numérique impose sur la valeur du pas de temps une restriction plus contraignante lorsque le schéma numérique est explicite. Cependant, en deux dimensions, un traitement implicite en différences finies introduit des systèmes pentadiagonaux. Des schémas existent [21] qui ramènent la résolution à celle de systèmes tridiagonaux mais cela n'est pas nécéssairement compétitif avec l'emploi d'un schéma totalement explicite.

- **La présence d'instabilités** :

  Les instabilités peuvent conduire à l'apparition de "points chauds". On se trouve alors en présence de très forts gradients. De manière générale, leur manifestation accentue la disparité d'échelles évoquée précédemment, et conduit souvent au *crash* du calcul en cours.

6.2.2 Méthode numérique utilisée

Par soucis d'accès, de maîtrise et afin de s'assurer une certaine souplesse de l'outil numérique, le choix a été fait de développer entièrement le code de simulation plutôt que de chercher à utiliser/adapter un programme ou logiciel préexistant.

La méthode utilisée est celle des différences finies, qui présente un bon compromis entre robustesse, efficacité, simplicité de mise en œuvre et investissement requis. Les équations sont exprimées dans un repère attaché au front de flamme de façon à considérer un maillage fixe. Celui-ci est structuré et uniforme.

Bien qu'on s'intéresse principalement aux solutions stationnaires, il est intéressant d'en connaitre les limites d'existence et le comportement des solutions instables. On choisit alors d'atteindre la solution stationnaire par le biais du système vraiment instationnaire plutôt que par l'utilisation de méthodes itératives.

Par ailleurs, divers profils de réactivité sont envisagés.

Schéma de résolution

Les équations sont d'abord discrétisées (globalement au deuxième ordre) d'un point de vue spatial puis un schéma Euler explicite (du premier ordre) est utilisé pour l'évolution temporelle des solutions.

Afin de considérer un domaine de calcul s'adaptant à l'échelle transversale de longueur L, des variables d'espace rapportées à L sont introduites ($X = x/L$, $Z = z/L$). Sont donc utilisées pour la résolution numérique les expressions suivantes, adaptées de [10] :

$$\begin{aligned}\theta_{i,j}^{\nu+1} &= \theta_{i,j}^{\nu} + \delta t w^{\nu}\left(\theta_{i,j}^{\nu}, a_{i,j}^{\nu}, z_j\right) - C_{adv}\left(\theta_{i+1,j}^{\nu} - \theta_{i-1,j}^{\nu}\right) \\ &\quad + C_{diff,x}\left(\theta_{i+1,j}^{\nu} - 2\theta_{i,j}^{\nu} + \theta_{i-1,j}^{\nu}\right) + C_{diff,z}\left(\theta_{i,j+1}^{\nu} - 2\theta_{i,j}^{\nu} + \theta_{i,j-1}^{\nu}\right)\end{aligned} \tag{6.3}$$

$$a_{i,j}^{\nu+1} = a_{i,j}^{\nu} - \delta t w^{\nu}\left(\theta_{i,j}^{\nu}, a_{i,j}^{\nu}, z_j\right) - C_{adv}\left(3a_{i,j}^{\nu} - 4a_{i-1,j}^{\nu} + a_{i-2,j}^{\nu}\right) \tag{6.4}$$

avec

$$C_{adv} = \frac{\delta t U}{2L\delta x} \tag{6.5}$$

$$C_{diff,x} = \frac{\delta t}{(L\delta x)^2} \tag{6.6}$$

$$C_{diff,z} = \frac{\delta t}{(L\delta z)^2} \tag{6.7}$$

Les indices i, j (resp. ν) se rapportent à la discrétisation spatiale (resp. temporelle). Les pas d'espace (resp. de temps) sont notés δx et δz (resp. δt).

Deux points peuvent être soulignés concernant la discrétisation de l'équation pour a. Du point de vue de cette grandeur, la flamme est une onde qui se propage par compétition entre advection et réaction. L'absence de diffusion dans ce mécanisme de propagation rend le milieu frais sourd à l'approche de l'onde réactive. Le schéma numérique utilisé veille à ne pas introduire de diffusion numérique. D'autre part, c'est le sens de propagation de "l'information" qui est respecté via un schéma sur trois points approchant la dérivée première $\partial a/\partial X$ au point x_i au moyen des points x_i, x_{i-1} et x_{i-2} (quant il aurait pu – comme l'est le terme $\partial\theta/\partial X$ – être discrétisé au moyen des points x_{i-1}, x_i et x_{i+1}).

Reste à déterminer la valeur de U, qui est aussi une inconnue (scalaire) du problème. La contrainte ajoutée aux equations afin de déterminer U est l'attachement [29] du front en un point donné (noté *) du domaine.

Le front n'est pas infiniment mince, mais la fraction massique en réactif subit un saut si brusque[18] à travers la zone de réaction, qu'un point auquel la fraction massique vaut 1/2 semble[19] représentatif. Le point (*) est de plus choisi sur l'axe x, donc au "nez" des fronts simulés (tous de forme ogivale), à l'abscisse $-L/2$.

La valeur de U utilisée pour calculer la solution au temps $(\nu + 1)$ s'écrit

[18] La quasi-discontinuité du profil de fraction massique en réactif à la traversée du front est propre à l'absence de diffusion dans les milieux solides.

[19] Le choix du point * n'est pas indifférent : il l'est dans le cas stationnaire, puisqu'alors la flamme se propage "en bloc", mais hors de ce cas, la célérité U telle qu'on l'a définie varie selon la grandeur et le point considéré.

alors :

$$U^{\nu+1} = -2\frac{\delta x L w^{\nu}}{\left(3a^{\nu}_{i_*,j_*} - 4a^{\nu}_{i_*-1,j*} + a^{\nu}_{i_*-2,j*}\right)} \tag{6.8}$$

Domaine de calcul

Étant donnée la symétrie du problème par rapport à l'axe longitudinal, seul le demi-domaine $Z \geq 0$ est retenu pour effectuer la simulation. Le domaine de calcul est donc défini ainsi : $\mathcal{D} = \{(X, Z) \in [X_{min}, X_{max}] \times [0, Z_{max}]\}$.

Initialisation

Les champs utilisés pour initialiser le calcul sont construits à partir de la solution exacte du système monodimensionnel (2.27-2.28) et de la coordonnées parabolique ξ au moyen de laquelle est exprimée la solution du modèle à fonction-δ.

Plus précisément, la valeur de θ utilisée sur l'axe de propagation (l'axe x) est celle de la solution monodimensionnelle. À chaque point du domaine (et donc de l'axe) est par ailleurs associée une valeur de ξ. Dans le cadre du modèle à fonction-δ, les isothermes de la solution stationnaire sont les iso-ξ. Pour chaque point du domaine hors de l'axe, on utilise alors la valeur de ξ correspondante pour prélever la valeur de θ sur l'axe x et initialiser le champ de température. La valeur de a est quant à elle calculée d'après la relation (2.28).

Conditions aux limites.

Les conditions aux limites retenues sont rassemblées dans le tableau suivant. L'absence de condition en $X = X_{max}$ pour a vient de ce qu'à la limite

Frontière	Condition sur θ	Condition sur a	Interprétation
$X = X_{min}$	$\theta = 0$	$a = 1$	milieu frais
$X = X_{max}$	$\partial^2\theta/\partial X^2 = 0$	$\varnothing$	pente libre
$Z = 0$	$\partial\theta/\partial Z = 0$	$\partial a/\partial Z = 0$	condition de symétrie
$Z = Z_{max}$	$\partial\theta/\partial Z = 0$	$\partial a/\partial Z = 0$	plus de variations

$Le = +\infty$, l'ordre de l'équation de bilan en quantité de réactif dégénère.

On dispose ainsi d'un code FORTRAN (77) permettant de résoudre le système instationnaire en 2D (une version 3D-axisymétrique existe) pour tous les profils de réactivité envisageables. Une version parallélisée a également été développée au moyen de la bibliothèque MPI-1, et s'appuie sur la méthode de décomposition de domaine[18] – décomposition effectuée suivant la seule direction x.

6.2.3 Validation et sensibilité des résultats numériques à la finesse du maillage

On dispose, lorsqu'on utilise la fonction $f_n(\theta)$ dans le terme de production, d'une solution exacte pour la flamme plane. Pour une valeur $n < n_{crit}^{2D}$ celle-ci est stable et constitue[20] un moyen de valider le code. La confrontation de la solution numérique avec la solution $\bar{\theta}$, $\bar{a}$ est portée dans le tableau ci-dessous, où N_F désigne le nombre de nœuds par unité de longueur l_T (c'est-à-dire à peu près le nombre de points utilisé pour décrire le saut de a au niveau du front) ; δU désigne la valeur absolue de l'écart entre U et la valeur théorique 1 ; ϵ_{max} désigne l'erreur maximale définie selon $\epsilon_{max} = \max_{i,j}\left(|\theta_{i,j} - \bar{\theta}_{i,j}|, |a_{i,j} - \bar{a}_{i,j}|\right)$.

N_F	δU	ϵ_{max}
5	$21\,10^{-3}$	$16\,10^{-3}$
10	$5.9\,10^{-3}$	$6\,10^{-3}$
15	$2.7\,10^{-3}$	$3\,10^{-3}$
20	$1.5\,10^{-3}$	$1.6\,10^{-3}$

On vérifie également au moyen des résultats reportés dans le tableau (pour $n = 5$) que la solution obtenue est raisonnablement sensible à la finesse du maillage utilisé.

[20] On peut par ailleurs faire la remarque suivante en anticipant sur les résultats à venir, à savoir que la coïncidence des résultats obtenus par DNS avec les prédictions du modèle à fonction-δ constitue d'une certaine façon une confirmation de la validité du code dans le cas d'un front courbe.

En ce qui concerne les conditions aux limites, celle employée à la frontière située en aval du front (i.e. $X = X_{max}$) peut être sujette à questionnement. Cependant, d'après des calculs mis en Annexe C et qui concernent la forme du noyau de Green associé aux équations de réaction-diffusion, les conditions en un point du domaine n'influent en amont de ce point que sur une distance exponentiellement faible. La perturbation de la solution que constitue la condition au bord aval ne doit donc pas remettre en cause la validité de la solution obtenue.

6.3 Simulation de flammes courbes : solutions stationnaires

Les solutions stationnaires présentent, pour un profil de réactivité transversal donné, toutes la même forme. Le front est – comme le prévoit le modèle à fonction-δ – de forme parabolique (ou paraboloïdale, selon la dimension considérée) lorsque le profil de réactivité est Lorentzien. Ce cas fait l'objet de la sous-section qui suit. Sont présentées ensuite les solutions obtenues pour d'autres profils de réactivité. Pour finir, on aborde un cas où la stratification s'exprime à la fois en terme de composition et en terme de réactivité.

6.3.1 Cas de la flamme parabolique/paraboloïdale

Les résultats obtenus par simulation numérique pour le calcul d'une flamme se propageant dans un canal Lorentzien sont, à deux dimensions comme à trois (3D-axisymétrique), en très bon accord avec les prédictions du modèle à fonction-δ tant que la valeur de n n'est pas trop importante (Fig. 6.1 à 6.3).

L'écart entre ces résultats est très faible pour des largeurs de canal suffisamment supérieures à la largeur critique L_Q à laquelle est supposée apparaitre l'extinction. Les prédictions du modèle à fonction-δ s'avèrent non-valides "à proximité" de L_Q, et ce notamment dans la mesure où la flamme devient instationnaire (même pour de faibles valeurs de n, telles $n = 5$, bien inférieures au seuil de stabilité de la flamme plane). Lorsque la valeur de n augmente, la

solution stationnaire nécessite pour être observée des canaux de plus en plus larges.

Ces observations semblent par ailleurs valables pour tous les profils de réactivité envisagés.

On restreint ici volontairement les commentaires à propos des solutions instables, qui prennent place ultérieurement dans une section offerte à leur développement.

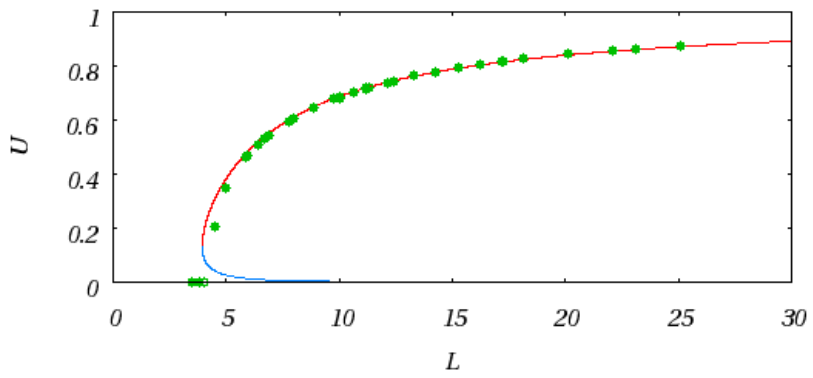


Figure 6.1 – Courbes de réponse statique pour la flamme parabolique et pour $n = 5$. (–) courbe théorique, (•) calculs DNS. Les calculs effectués ici n'impliquent pas de valeur de L suffisamment proche de L_Q pour révéler le comportement instable.

Un exemplaire des champs de température et de fraction massique en réactif obtenus en 2D et 3D-axisymétrique apparaissent sur les figures 6.4 et 6.5.

On constate visuellement la raideur du saut de concentration à la traversée de la zone réactive, alors que le profil de température – bien que raide également – évolue sur une épaisseur de l'ordre de n fois plus importante : la zone de préchauffage visible en bleu.

Il est intéressant de comparer la forme du front obtenue par le calcul avec la parabole présagée lors de l'approche théorique. La figure 6.6 reproduit pour cela les champs de valeurs obtenus pour le terme de production w, auquels on superpose la parabole (ou la section de paraboloïde) du modèle à fonction-δ. L'accord entre les deux est manifeste.

Remarque : on interprète comme un effet des conditions aux limites en

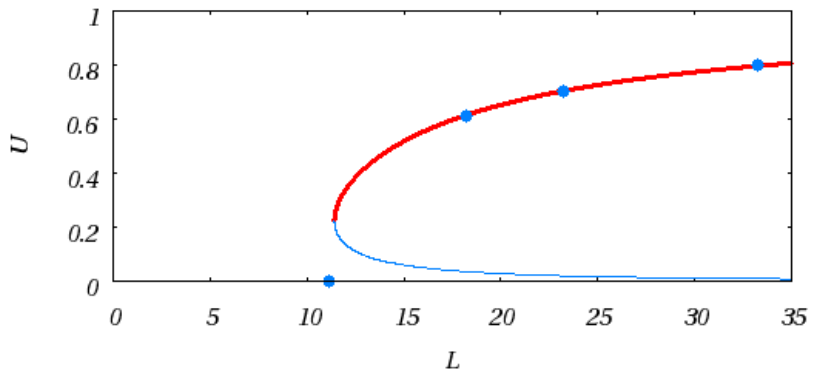


Figure 6.2 – Courbes de réponse statique pour la flamme paraboloïdale et pour $n = 5$. (–) courbe théorique, (•) résultats de calculs DNS. Les calculs effectués ici n'impliquent pas de valeur de L suffisamment proche de L_Q pour révéler le comportement instable.

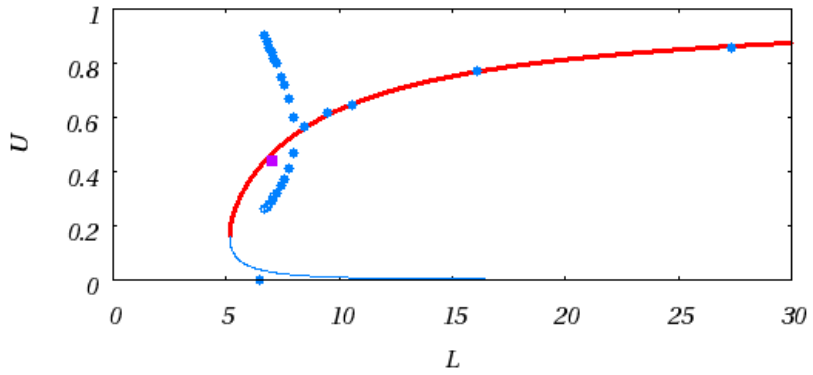
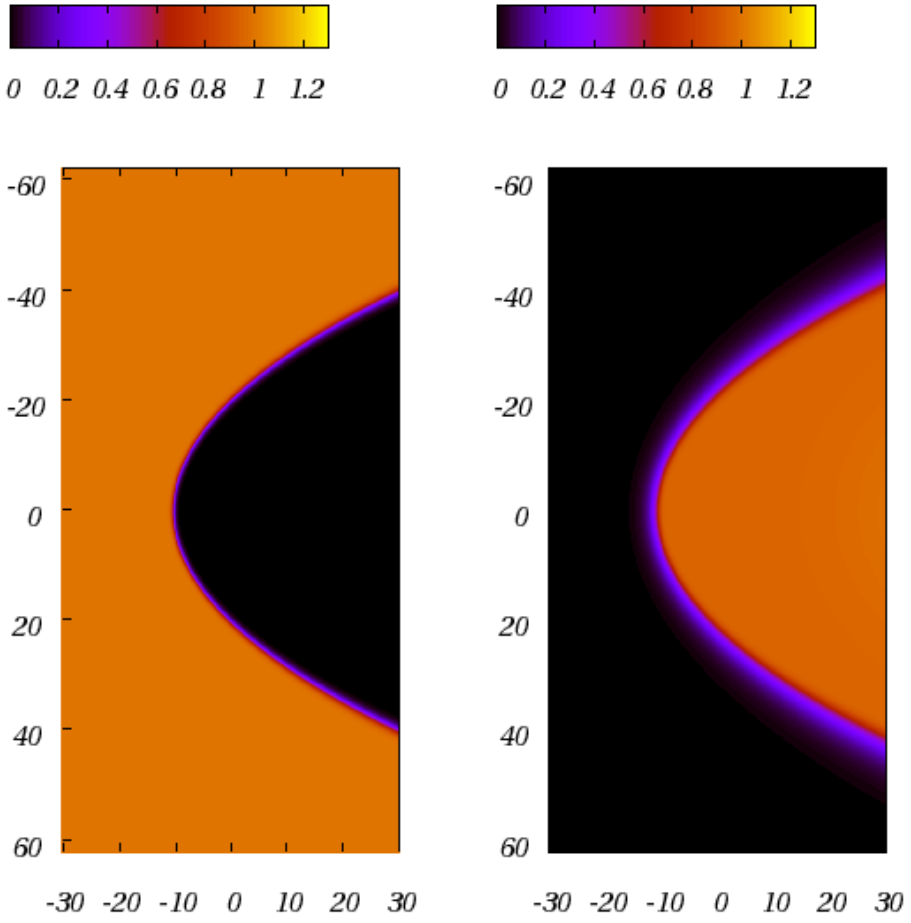


Figure 6.3 – Courbes de réponse statique pour la flamme parabolique et pour $n = 6$. (–) courbe théorique, (•) résultats de calculs DNS, (■) résultats DNS moyennés sur une période. Les calculs effectués ici révèlent une première bifurcation pour $L \simeq 8$. D'autres bifurcations apparaissent pour des valeurs inférieures de L, qui ne sont pas reportées sur la figure. On note de plus l'apparition d'une extinction prématurée.

$X = X_{max}$ (à l'aval du front) la perturbation qui apparaît à l'intersection de la zone réactive avec le bord du domaine. L'accord des résultats obtenus avec ceux du modèle à fonction-δ montre[21] cependant que cet effet de bord est local

[21] C.f. l'expression déjà évoquée du noyau de Green de l'opérateur d'advection-reaction-

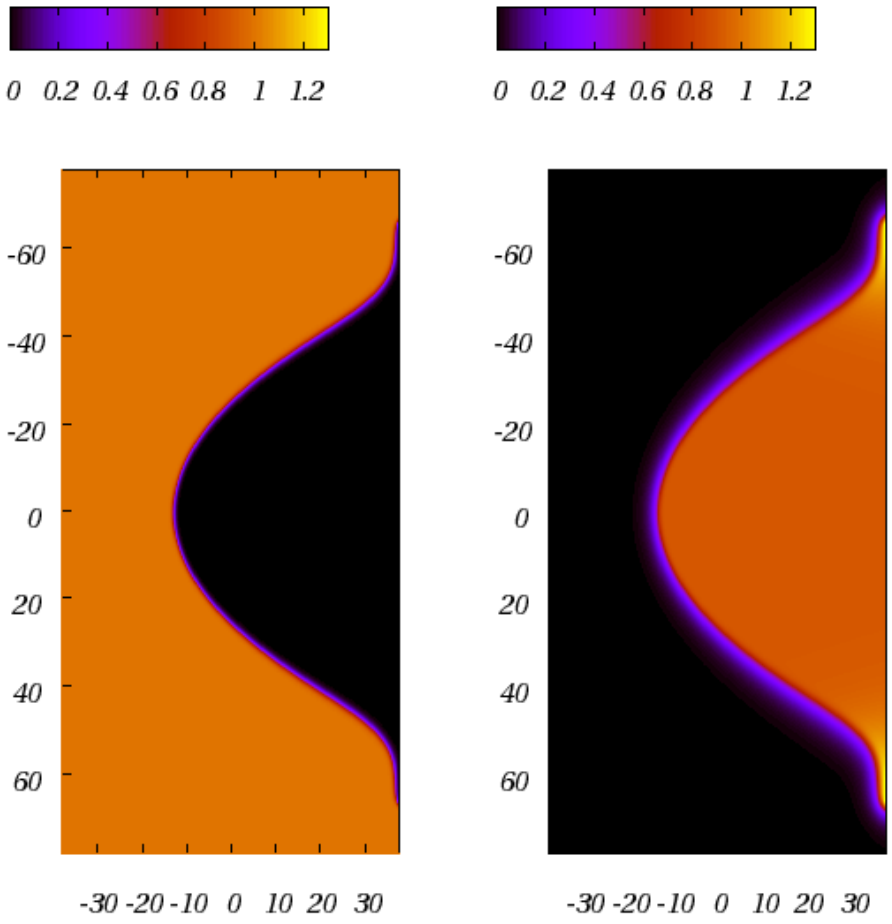


(a) (b)

Figure 6.4 – Solution 2D stable obtenue par DNS pour $n = 5$ et $L = 20$, et un profil de réactivité Lorentzien. (a) Fraction massique en réactif a ; (b) température θ.

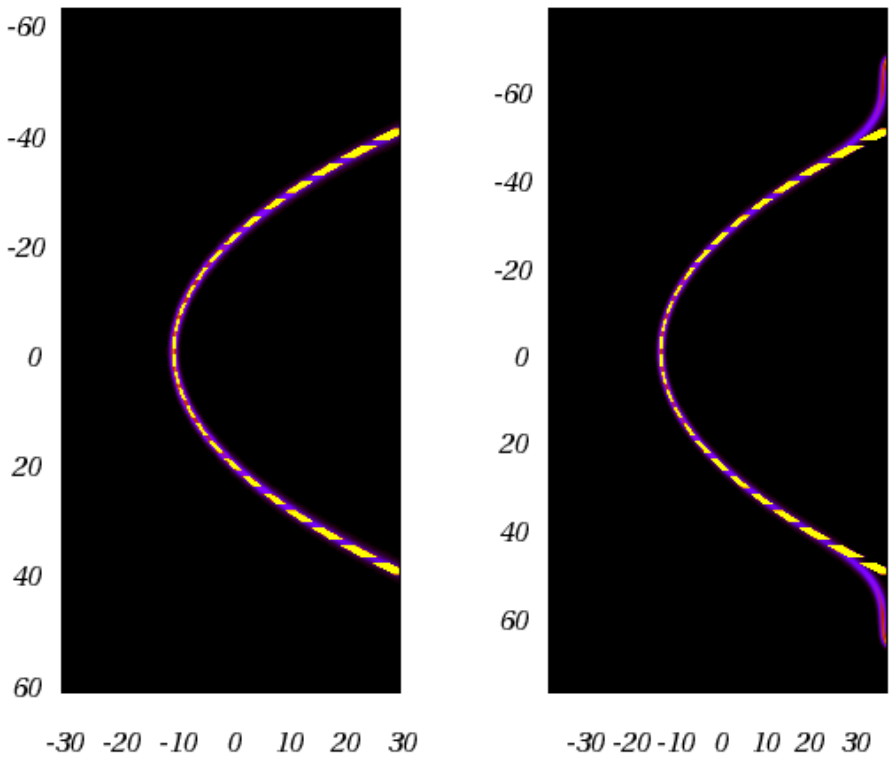
et sans conséquence sur la célérité du front.

diffusion en Annexe C.



(a) (b)

Figure 6.5 – Solution 3D-axisymétrique stable obtenue par DNS pour $n = 5$ et $L = 25$, et un profil de réactivité Lorentzien. (a) Fraction massique en réactif a (b) température θ.



(a) (b)

Figure 6.6 – Champs du terme de production (w) obtenus par DNS pour $n = 5$, auxquels sont supperposées les formes paraboliques de front issues du modèle à fonction-δ. (a) solution 2D Lorentzienne pour $L = 20$; (b) solution 3D-axisymétrique Lorentzienne pour $L = 25$.

6.3.2 Comparaison avec d'autres profils de réactivité

Le modèle serait de portée relativement restreinte s'il n'était valide que pour le cas très particulier de la flamme parabolique, pour laquelle *le front est isotherme*, de telle sorte qu'en aval du front tous les gradients sont nuls. Des calculs ont donc été effectués pour divers profils de réactivité – certains étant à support fini – (voir figure 6.7) afin de vérifier l'observation d'un comportement similaire au cas des flammes paraboliques vis-à-vis de L et d'une possible extinction.

Les profils de réactivité considérés sont les suivants :

$$g_0(z) = \frac{1}{1+\frac{z^2}{L^2}}, \qquad \text{(Lorentzien)} \tag{6.9}$$

$$g_1(z) = e^{-\frac{z^2}{L^2}\rho_1^2}, \qquad \rho_1 = \frac{L}{L_1} = 1 \qquad \text{(Gaussien)} \tag{6.10}$$

$$g_2(z) = \begin{cases} \frac{1+\cos(\frac{\pi z}{L}\rho_2)}{2} & \text{si } |z| \leq L_2 \\ 0 & \text{si } |z| \geq L_2 \end{cases}, \quad \rho_2 = \frac{L}{L_2} = \frac{\pi}{2} \qquad \text{(Cosinus)} \tag{6.11}$$

$$g_3(z) = \begin{cases} cos(\frac{\pi z}{L}\rho_3) & \text{si } |z| \leq L_3/2 \\ 0 & \text{si } |z| \geq L_3/2 \end{cases}, \rho_3 = \frac{L}{L_3} = \frac{\sqrt{2}\pi}{2} \text{(1/2-cosinus)} \tag{6.12}$$

$$g_4(z) = \begin{cases} \sqrt{1-\frac{z^2}{L^2}\rho_4^2} & \text{si } |z| \leq L_4 \\ 0 & \text{si } |z| \geq L_4 \end{cases}, \rho_4 = \frac{L}{L_4} = \frac{\sqrt{2}}{2} \quad \text{(1/2-cercle)} \tag{6.13}$$

$$g_5(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } |z| \leq L_5 \\ 0 & \text{si } |z| \geq L_5 \end{cases}, \qquad \text{(Créneau)} \tag{6.14}$$

La figure 6.8 offre la comparaison des formes de front obtenues (front que l'on définit comme la courbe isovaleur $a = 1/2$), les profils de réactivité ayant tous été paramétrés de façon à présenter une même courbure au sommet, excepté $g_5(z)$ qui, étant constant par morceaux, y est de courbure nulle. On remarque comme les ailes du front s'applatissent avec la perte de réactivité, jusqu'à devenir parallèles à l'axe de propagation dans le cas d'un profil de réactivité demi-circulaire.

La figures 6.11 présente les champs de température correspondant. L'intensité de la réaction est quand à elle reportée sur la figure 6.12. On constate que le terme de production s'annule à distance finie du nez du front lorsque le profil de réactivité est à support compact.

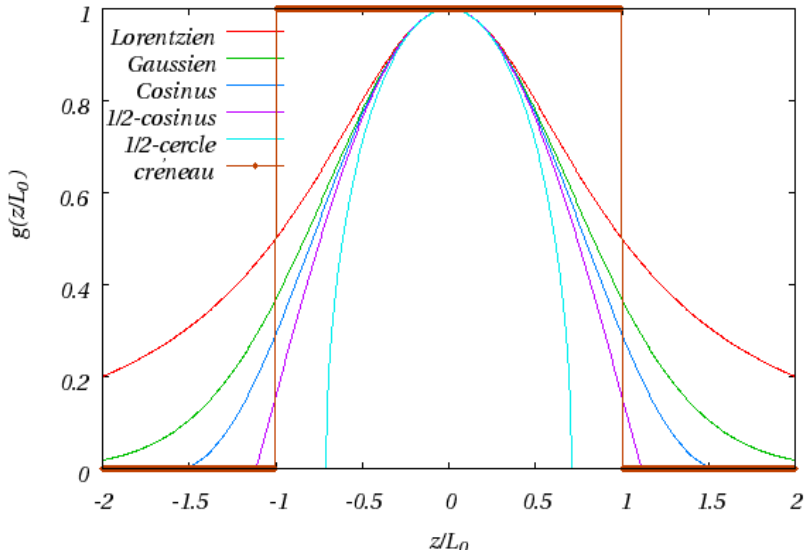


Figure 6.7 – Profils de réactivité définis par les relations (6.9-6.14).

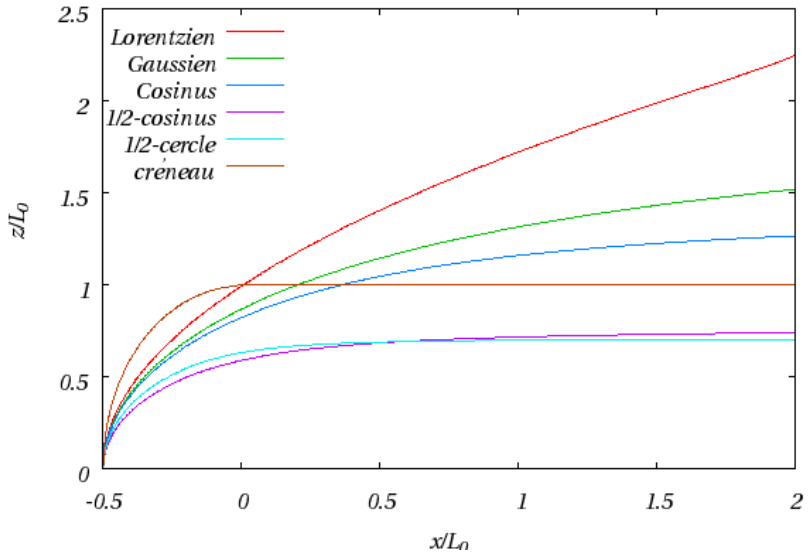


Figure 6.8 – Formes stationnaires obtenues pour les fronts de flamme associés aux profils de réactivité g_0 à g_5 (6.9-6.14), et pour $n = 5$ et $L = 20$.

Deux courbes de réponse statique ont de plus été tracées (Fig.6.9 et 6.10) : l'une pour le profil Gaussien $g_1(z)$ et l'autre pour un profil à support fini : $g_3(z)$. Le comportement observé est similaire au cas de la flamme parabolique.

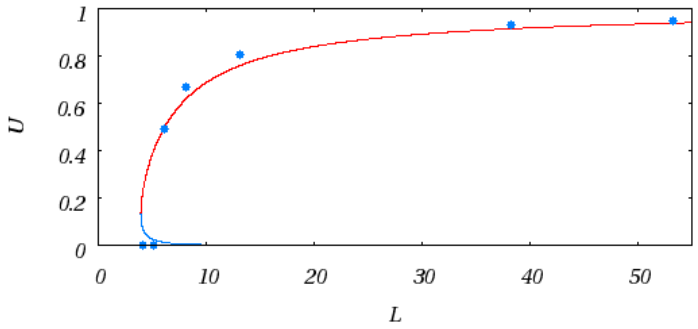


Figure 6.9 – (•) Points de la courbe de réponse statique pour $g_1(z)$ (Gaussien) et $n = 5$. (–) Courbe de réponse statique issue du modèle à fonction-δ pour $g_0(z)$ (Lorentzien) et $n = 5$, reproduite ici à titre indicatif, ne pouvant être objet de comparaison véritable ; et pourtant. . . !

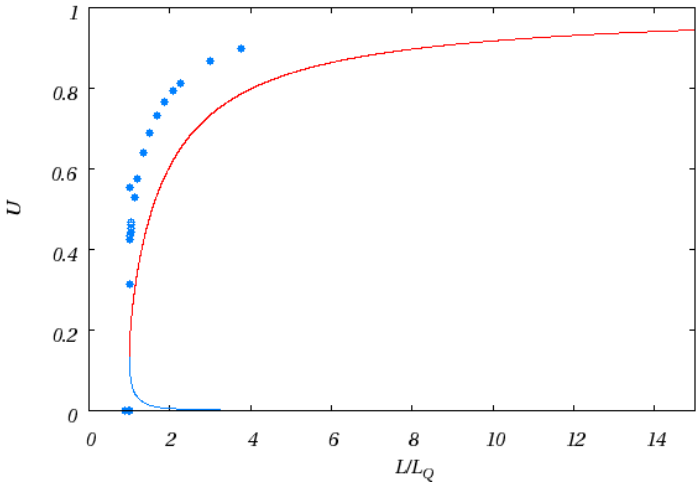


Figure 6.10 – (•) Points de la courbe de réponse statique pour $g_3(z)$ (1/2-cosinus) et $n = 5$. (–) Courbe de réponse statique issue du modèle à fonction-δ pour $g_0(z)$ (Lorentzien) et $n = 5$, reproduite ici à titre indicatif, ne pouvant être objet de comparaison. Du fait de la différence importante de valeur de L_Q entre ces deux courbes (environ 13.3 pour la première contre 3.94 pour la seconde), elles sont représentées en fonction de L/L_Q.

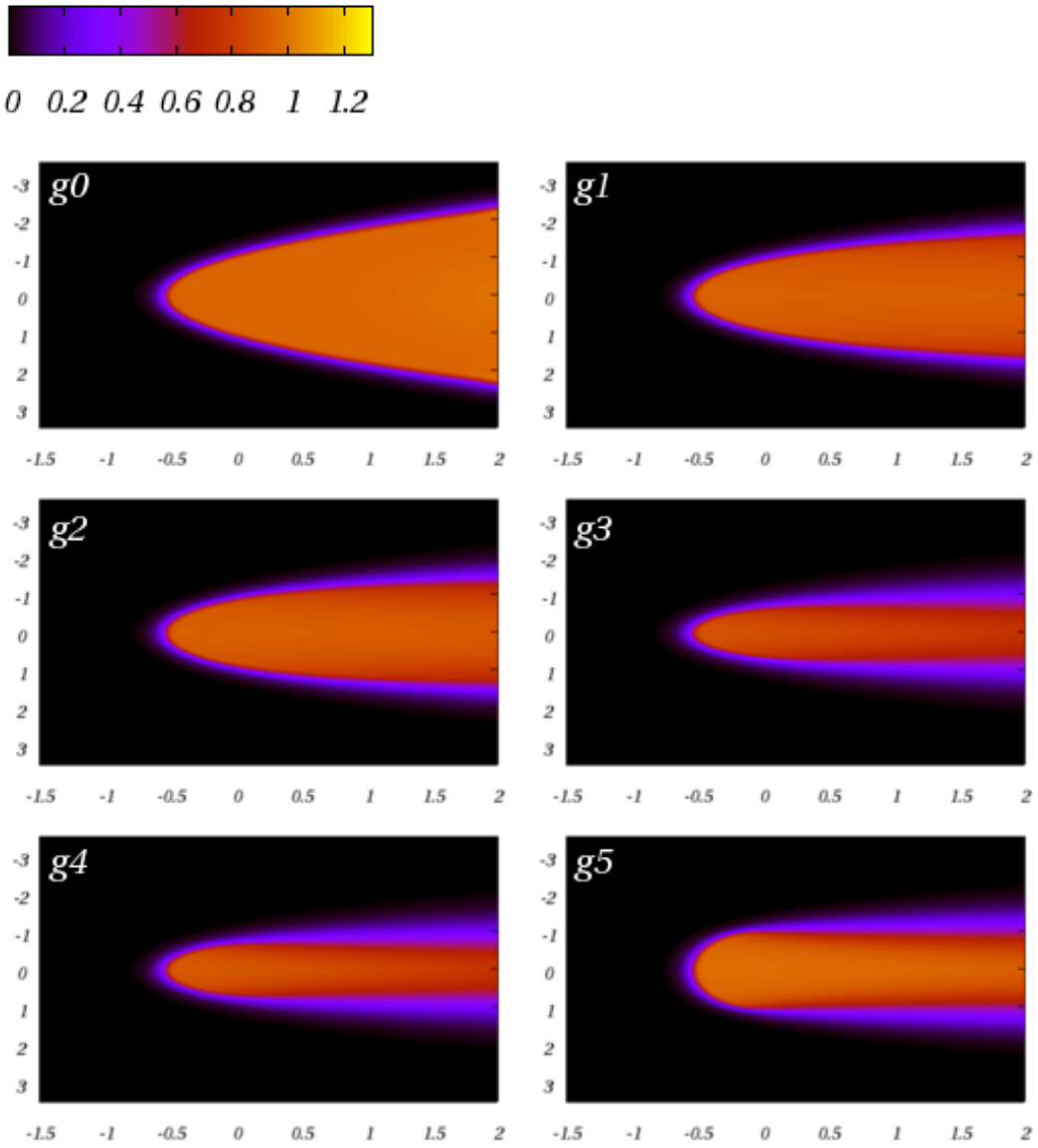


Figure 6.11 – Champs de température θ associés aux solutions stationnaires obtenues pour les divers profils de réactivité (6.9-6.14). $n = 5$ et $L = 20$.

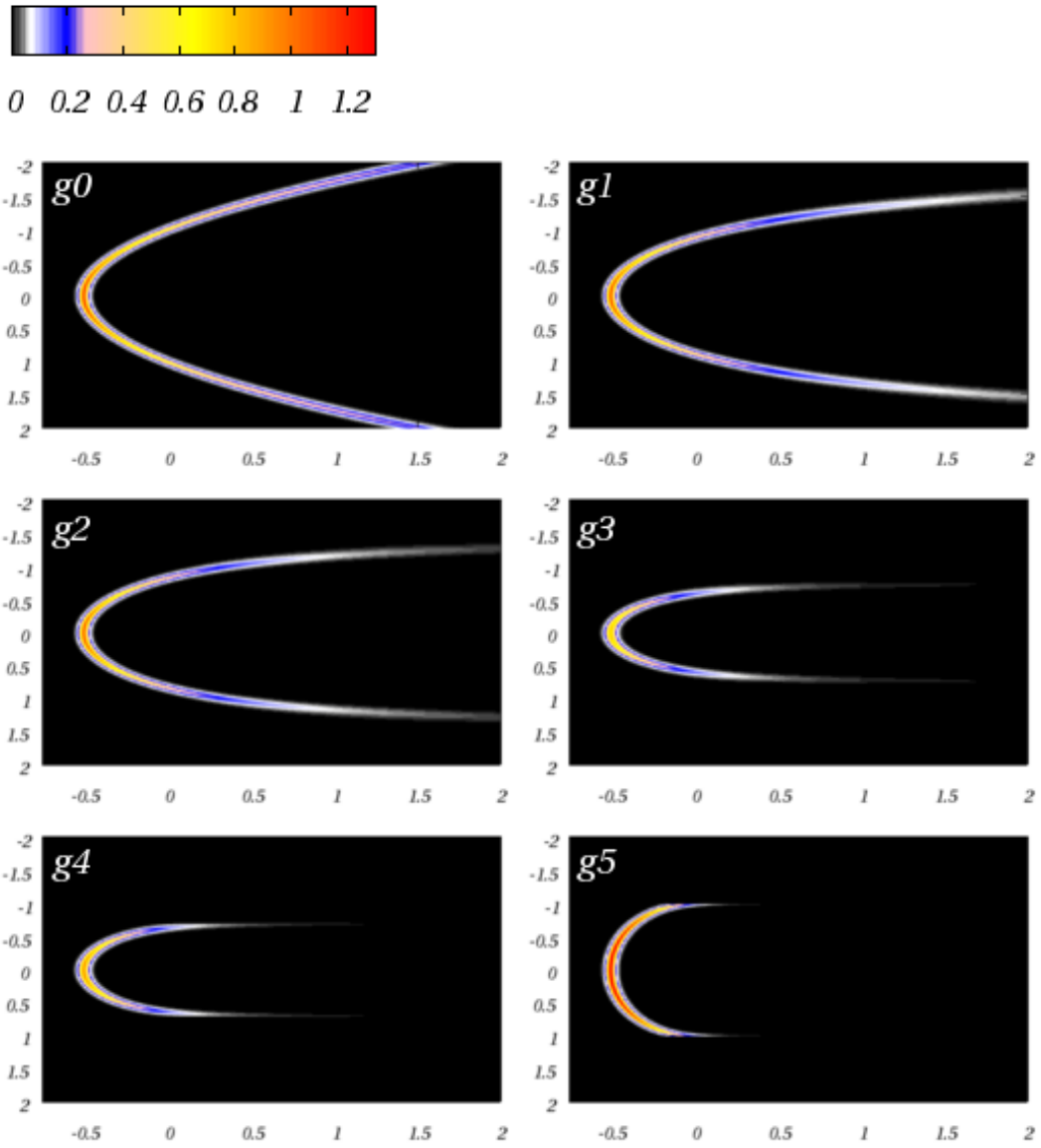


Figure 6.12 – Champs de production w associés aux solutions stationnaires obtenues pour les divers profils de réactivité (6.9-6.14). $n = 5$ et $L = 20$.

6.3.3 Cas de stratification par la composition

On peut varier l'origine de la stratification, et l'introduire par le biais de la concentration en réactif et non plus de la réactivité, voire encore en conjuguant les deux facteurs. C'est cette dernière situation qui est envisagée ici.

Comme souligné au cours du chapitre présentant l'étude asymptotique de la flamme courbe, les variations de concentration et de réactivité jouent un rôle similaire vis-à-vis de la forme du front. En effet, leurs influences peuvent être regroupées en un terme $V(z)$ et l'équation pour la forme du front s'écrire :

$$\frac{U}{\sqrt{1+\phi_z^2}} = \sqrt{V(z)} \cdot e^{-\beta \frac{\phi_{zz}}{2U}} \tag{6.15}$$

$$V(z) = g(z)\, e^{\beta(a(-\infty,z)-1)} \tag{6.16}$$

Ainsi, on devrait pouvoir obtenir un front quasi-parabolique non seulement lorsque le milieu est à réactivité variable seule et suivant un profil Lorentzien $g_0(z)$, mais aussi lorsque la composition est variable, du moment que $V(z) \equiv g_0(z)$.

On considère ainsi les mileux suivants, qui vérifient $V(z) = g_0(z)$:

$$g(z) = (g_0(z))^{\nu} \tag{6.17}$$

$$a(-\infty, z) = 1 + \frac{1-\nu}{\beta} \log g_0(z) \tag{6.18}$$

et plus particulièrement les deux cas :

$$\text{Milieu 1 :} \nu = 1 \tag{6.19}$$

$$\text{Milieu 2 :} \nu = 1/2 \tag{6.20}$$

Ces deux configurations ont été testées numériquement, et conduisent bien à deux fronts de flamme paraboliques et identiques (Figs. 6.13 et 6.14). L'écart relatif correspondant sur la vitesse de flamme est de l'ordre d'un pour mille ($U = 0.841$ dans un cas et $U = 0.842$ dans l'autre).

Afin de se convaincre que ce résultat n'est pas restreint aux propriétés particulières que présentent les solutions paraboliques, on reprend ce dernier calcul en construisant les deux milieux (réactivité variable seule et réactivité plus composition variables) à partir du profil Gaussien g_1.

Les calculs conduisent encore à des solutions proches l'une de l'autre (Figs. 6.15 et 6.16), même si l'écart sur la forme du front s'avère légèrement plus important. La vitesse de flamme n'en demeure pas moins très similaire : 0.820 pour l'une contre 0.822 pour l'autre. Ainsi, un défaut de composition, **même s'il est faible** ($\mathcal{O}(1/\beta)$), suffit à délimiter un canal !

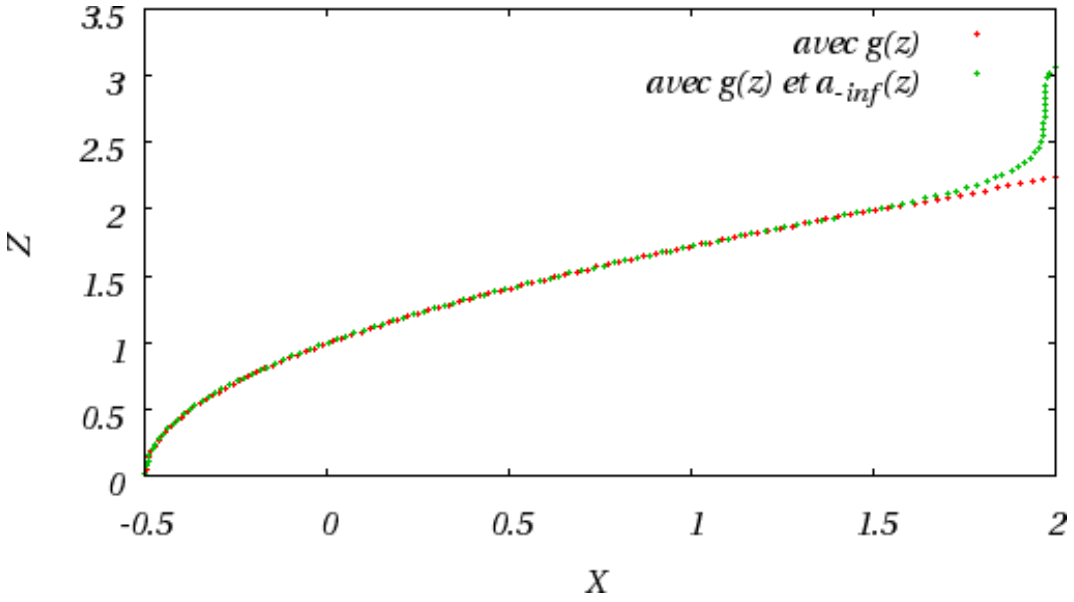


Figure 6.13 – Comparaison des fronts (courbes isovaleurs $a = 1/2$) obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 (6.19-6.20).

6.3.4 Conclusion

Les solutions obtenues par simulation numérique directe sont étonnamment proches de celles proposées par le biais du modèle à fonction-δ. En effet, ce dernier est un modèle précis au premier ordre en $1/n$ et l'on pouvait s'attendre à un écart de l'ordre de 10% entre prévision du modèle discontinu et résultats des simulations numériques. Ceci valide alors à la fois la méthode numérique utilisée et le modèle à fonction-δ.

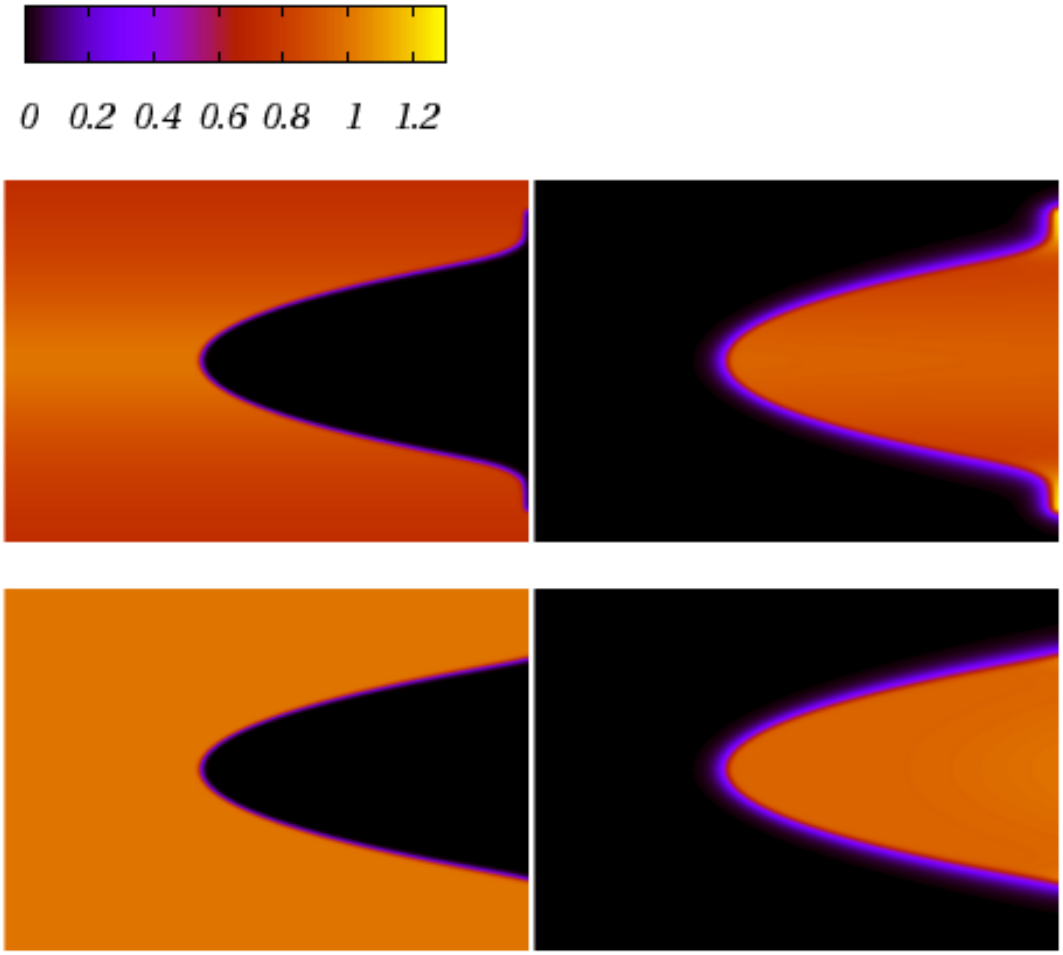


Figure 6.14 – Comparaison des champs obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 (6.19-6.20). Haut : milieu 2 ; Bas : milieu 1. Gauche : a ; Droite : θ.

6.4 Quelques observations sur les instabilités

La flamme courbe offre *a priori* un terrain encore plus propice à l'apparition d'instabilités que la flamme plane.

Il n'est pas question ici de mener véritablement une étude de l'instabilité : une telle étude est d'une part difficile à aborder d'un point de vue théorique[22] ;

[22] L'étude de stabilité linéaire pour la flamme plane montre que le premier mode instable est $k = 1/2$, correspondant à une longueur d'onde de 4π comparable avec les largeurs de canaux L_Q auxquelles apparaissent l'extinction. Ainsi la courbure locale du front et la longueur d'onde des perturbations auxquelles l'instabilité apparaît sont comparables. Cette situation

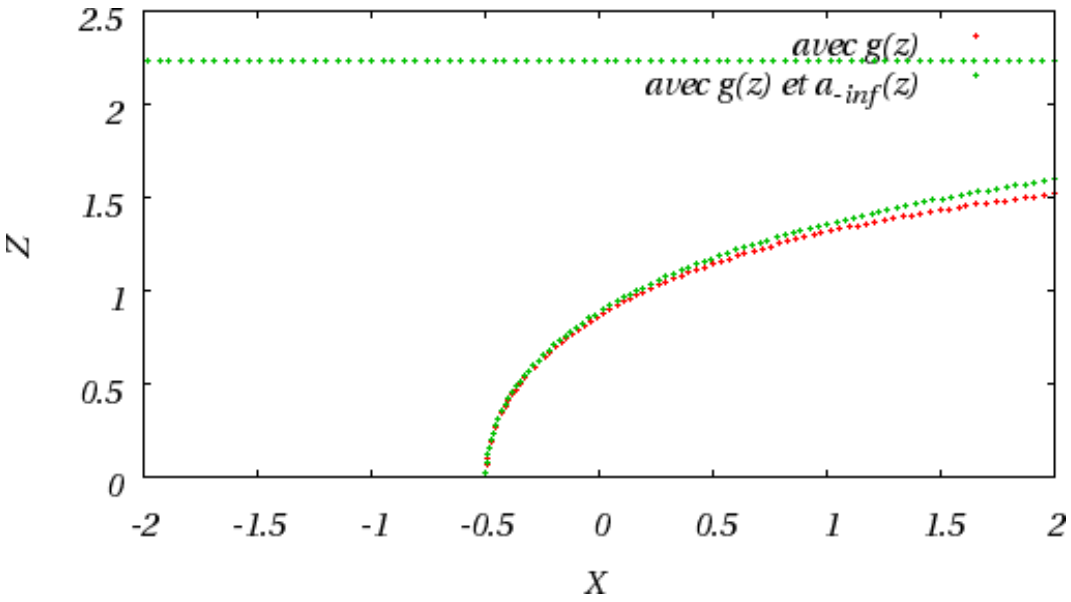


Figure 6.15 – Comparaison des fronts (courbes isovaleurs $a = 1/2$) obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 bâtis sur g_1 (Gaussienne).

d'autre part on s'éloignerait de l'objectif sous-jacent à ces travaux, qui est l'établissement d'un modèle de combustion en milieu désordonné. Les paragraphes qui suivent n'ont donc pas d'autre prétention que de décrire ce qui a pu être observé *numériquement* concernant ces instabilités, de préciser quels paramètres contrôlent l'apparition d'un front instable et quelles régions de l'espace de ces paramètres sont manifestement concernées par la perte de stabilité. La description faite ici n'a en l'occurence rien d'exhaustif et tient plus de situations rencontrées que "traquées". L'éventuelle remise en cause, par l'existence de ces instabilités, des conclusions tirées jusqu'alors est finalement discutée.

6.4.1 Manifestations des instabilités

Paramètres contrôlant l'instabilité et diagramme qualitatif

On sait déjà que β_{eff}, et donc n, est un paramètre déterminant pour la stabilité de la flamme. Ce paramètre ne contrôle cependant pas à lui seul la

ne permet pas d'utiliser l'approximation WKB, à partir de laquelle on aurait pu espérer mener une étude théorique.

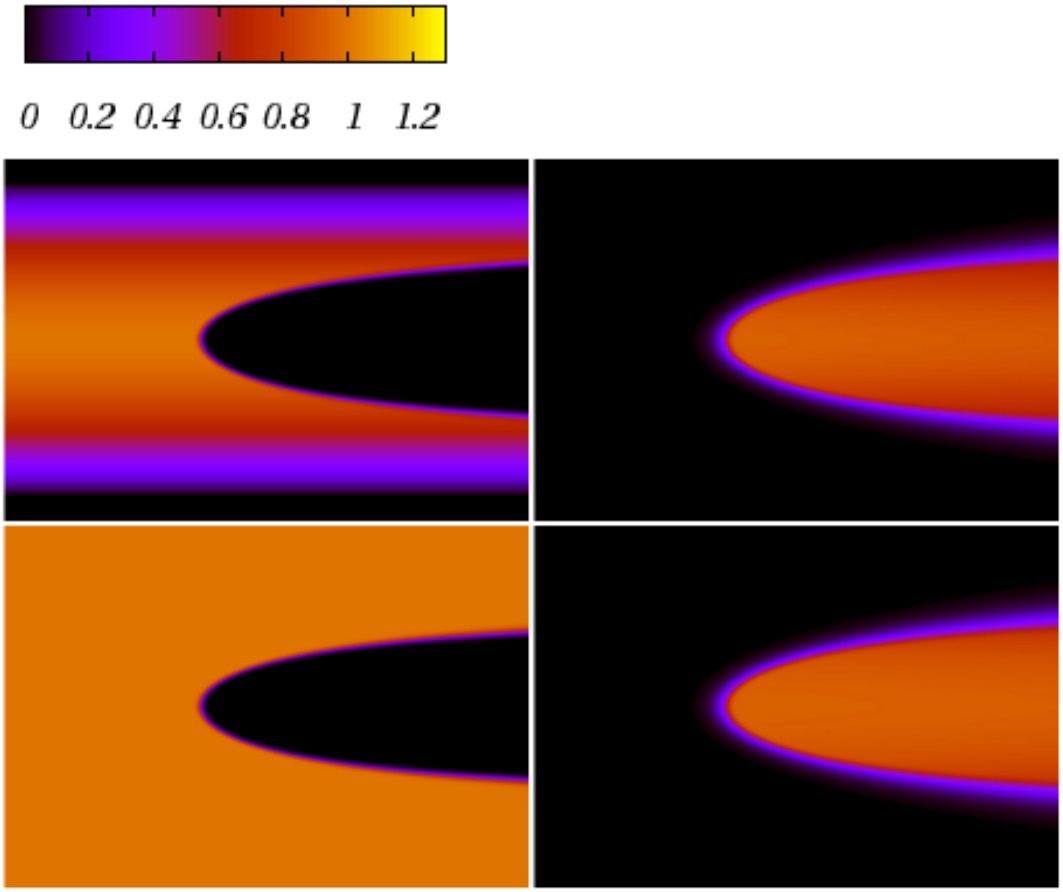


Figure 6.16 – Comparaison des champs obtenus par DNS pour les milieux 1 et 2 bâtis sur g_1. Haut : milieu 2 ; Bas : milieu 1. Gauche : a ; Droite : θ.

stabilité du front courbe : la largeur caractéristique L du canal réactif y joue également un rôle. La stabilité du front courbe doit donc présenter une complexité supérieure à celle du front plan, qui n'en constitue qu'un cas particulier (à la limite $L \to +\infty$).

D'après ce qui a pu être observé numériquement – c'est-à-dire pour des valeurs de n inférieures à 10, le code ne parvenant pas, au delà, à survivre aux conditions extrêmes auxquelles il est soumis – la stabilité de la flamme peut être assurée pour une plage de valeurs de L lorsque n est inférieur à une valeur critique n_{ii}. Au delà de cette valeur – que l'on peut supposer être celle à partir de laquelle le front plan stationnaire n'existe plus (c.f. cas $L \to +\infty$) – la flamme semble inconditionnellement instable.

Pour $n < n_{ii}$, le front stationnaire est observable pour des largeurs de canal suffisamment importantes, avec pour valeur critique une largeur $L_B(n)$ qui pourrait tendre vers l'infini lorsque $n \to n_{ii}$. En $L_B(n)$ apparaît une première bifurcation[23] qui, lorsque L décroît, donne lieu à des doublements de période (Fig. 6.22). Il n'est alors pas exclu qu'un processus de transition vers le chaos apparaisse. Dans tous les cas, lorsque la largeur du canal L devient inférieure à la valeur L_Q, l'extinction de la flamme se produit. Les simulations numériques montrent que l'extinction se manifeste pour des valeurs de L légèrement supérieures à la valeur L_Q attendue. Ceci correspond probablement au fait que la branche basse d'une des bifurcations successives apparaissant alors doit venir rencontrer la branche instable de la courbe de réponse statique pour une valeur L_M de L (Fig. 6.17). Les valeurs $L_Q \leq L \leq L_M$ définiraient alors une région métastable, conduisant à une extinction anticipée (Fig. 6.21, et aussi 6.3).

Il faut noter ici combien tous ces phénomènes se manifestent dans une région très restreinte du plan $n - L$, et notamment qu'entre la valeur de L à laquelle apparait le premier doublement de période et L_M se trouve une plage très étroite[24].

Il est possible qu'en deçà d'une valeur $n \leq n_{is}$ la flamme stationnaire soit inconditionnellement stable.

Est reportée sur la figure 6.18 une représentation qualitative du comportement que les simulations numériques laissent supposer. Une seule de ces frontières n'est pas tracée de manière approximative, c'est celle délimitant la zone d'extinction, qui est celle issue du modèle à fonction-δ.

[23] La bifurcation observée (par exemple pour $n = 6$) est une bifurcation de Hopf directe ; mais l'apparition d'une bifurcation inverse pour des n plus importants n'est pas exclue.

[24] Si l'on est effectivement en présence d'une cascade sous harmonique, la suite λ_i des positions auxquelles apparaissent les bifurcations successives présente [4] un rapport de réduction $\frac{\lambda_{i+1}-\lambda_i}{\lambda_i-\lambda_{i-1}}$ qui converge vers un facteur d'échelle $r < 1$ tel que les λ_i sont rapidement accumulés à proximité de λ_∞.

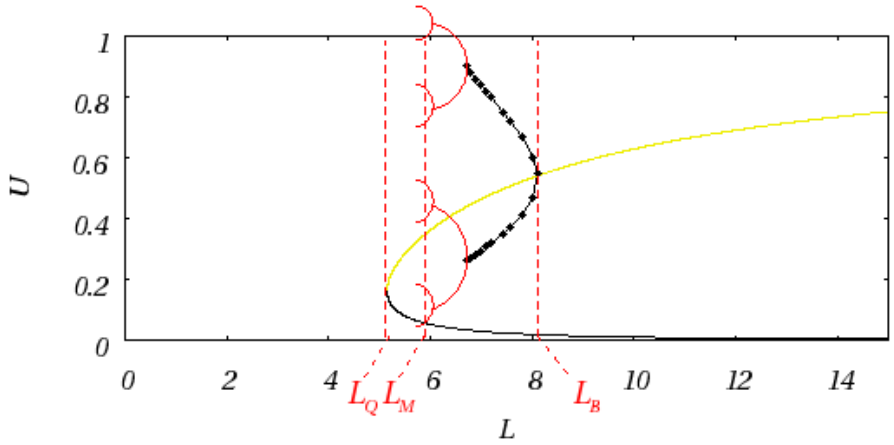


Figure 6.17 – Définition de L_Q, L_M, L_B. La première bifurcation rencontrée lorsque L décroît depuis l'infini est un résultat de calcul. Les autres, qui apparaissent en rouge, ne sont qu'une schématisation du scénario présumé.

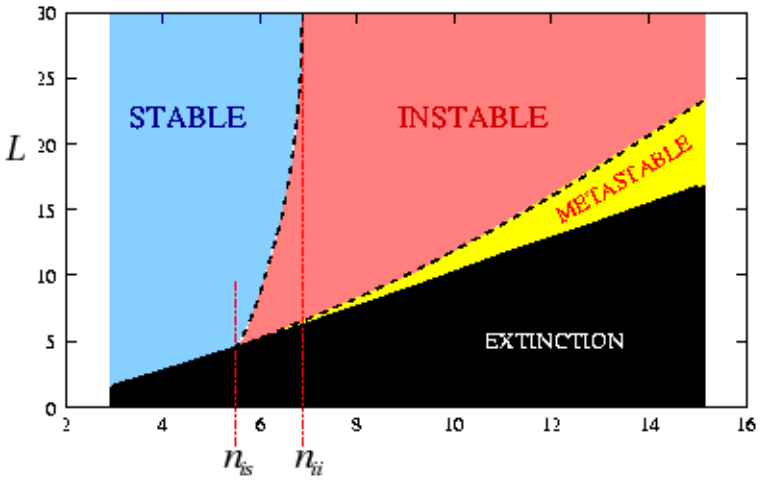


Figure 6.18 – Diagramme qualitatif pour la stabilité du front dans un champ de réactivité Lorentzien.

Manifestations de l'instabilité

L'instabilité du front courbe telle qu'observée présente beaucoup de points communs avec celle du front plan : oscillations de vitesse et plissements du front qui donnent lieu, lorsqu'on s'éloigne (dans le plan $n - L$) de la région stable, à l'apparition de points chauds de plus en plus marqués.

Pour $n = 6$ on peut voir (Fig. 6.22) que le "nez" du front accélère puis ralentit périodiquement, entrainant par ce mouvement l'oscillation du front autour de sa forme moyenne (Fig. 6.20). On peut notamment suivre les accélérations et ralentissements successifs du front par l'épaisseur de la couche préchauffée par la flamme (en bleu sur les figures), les périodes de propagation à faible vitesse (par rapport à la valeur 1 en unité S_L) correspondant au refroidissement de la flamme par diffusion de la chaleur vers les couches en amont. Puis la température de la pointe augmente – localement et soudainement – et la flamme accélère. Finalement, la séparation entre pointe chaude et ailes de la flamme prend une forme d'autant plus localisée que n est grand et qui s'éloignent de la pointe. Pour $n = 7$ (Fig. 6.24) le même phénomène est observé mais les mouvements des ailes du front ont moins d'amplitude tandis que les accélérations de la pointe du front sont plus marquées, la zone de séparation entre pointe chaude et ailes évoquée ci-dessus donnant lieu à des points chauds périodiquement libérés par la pointe et qui descendent le front. Pour $n = 8$ ceci est encore accentué, et des "éruptions" identiques à celle apparaissant à la pointe surgissent plus loin le long des ailes, donnant lieu à des points chauds remontant le long du front en direction de la pointe. Pour $n = 9$, on peut voir des points chauds en provenance de l'aval remontant le front sous la forme d'un bourrelet de taille qui croît à l'approche de la pointe, et ce avant même que la première accélération de la flamme. On peut voir une seconde génération de points chauds apparaitre, d'une part et à nouveau depuis l'aval, mais surgir également sur les bourrelets eux-mêmes. Le code ne résiste pas à l'arrivée de ces bourrelets à la pointe.

Le comportement général de la flamme instable semble donc être la superposition d'un mouvement d'ensemble oscillant et de points chauds apparaissant et se propageant le long du front avec un temps caractéristique inférieur à celui

du mouvement d'ensemble (la séquence exhibée pour $n = 9$ prend place aux premiers temps de la simulation, avant même que la première accélération du front n'ai eu lieu).

6.4.2 Remise en cause du critère de coincement ?

L'objectif premier de cette étude des flammes de canal est l'établissement d'un critère de coincement permettant d'identifier par la suite, lors de la construction d'un modèle de percolation de lien, le caractère passant ou non passant d'un lien (i.e. d'un canal) vis-à-vis d'une flamme. Les courbes $U - L$ établie par le biais du modèle à fonction-δ ont été validées numériquement pour des valeurs de n suffisamment faible, mais elles sont loin d'être valables dans tous les cas, du fait des instabilités. Cela peut-il mettre en défaut l'usage qu'on s'apprête à en faire ? La réponse semble négative. D'une part, le phénomène d'extinction pour de trop faibles largeurs de canal demeure, stabilité de la flamme ou pas. Ceci limite donc tout au plus la pertinence des résultats obtenus d'un point de vue quantitatif. Or, le comportement moyen de la flamme instable a été quantifié sur quelques simulations et il s'avère être tout à fait proche – pour les cas étudiés – du comportement qu'aurait la flamme si la solution stationnaire n'était pas sujette à l'instabilité. Le front est donc parabolique en moyenne, et la célérité moyenne est très voisine de celle qu'aurait le front stable.

Deux remarques peuvent être ajoutées ici. La première est que la présence de pertes thermiques ne doit pas non plus remettre en cause l'établissement du modèle de percolation tel qu'envisagé, mais rendre plus stricte la contrainte sur L pour éviter l'extinction. La seconde remarque concerne la possibilité que pourrait avoir la flamme de se "transmettre" à des canaux voisins : il n'est pas exclu que le passage d'une flamme dans un canal puisse par transfert de chaleur conduire à l'amorçage de la réaction de combustion dans un canal suffisamment proche, et conduire ainsi à l'apparition d'une flamme dans ce second canal.

6.5 Conclusion

À l'issue de ce chapitre, avec lequel s'achève également la première partie de ce mémoire, on dispose d'un modèle relativement robuste permettant de décrire la propagation d'une flamme dans un milieu réactif s'apparentant à un canal. La très bonne concordance entre résultats des simulations numériques effectuées et prédictions du modèle à fonction-δ valide à la fois le code développé et le modèle théorique.

La précision du modèle à fonction-δ est d'ailleurs inatendue alors que l'erreur sur la solution stationnaire est a priori de l'ordre de $1/n$. La plus grande précision observée est peut-être imputable au caractère tout à fait particulier du modèle parabolique, pour lequel le front est isotherme, si bien que la pente du profil de température en aval du front est nulle. Une autre hypothèse possible est l'existence d'un coefficient multiplicatif de très petite valeur attaché au terme correctif en $1/n$ [14]. La courbe U^2 vs $\frac{F(\theta_F)}{F(1)}$ (pour un front plan stationnaire) corrobore ceci (Fig. 6.19), même pour n aussi bas que $n = 5$.

On dispose par ailleurs d'un regard global sur le comportement de la flamme de canal : existence d'une solution stationnaire pour des valeurs "modestes" de l'énergie d'activation réduite, apparition d'instabilités pour des valeurs plus élevées de n, extinction pour des largeurs de canal trop étroites. Plus particulièrement, des courbes $U - L$ permettant de relier la célérité de propagation de la flamme à la taille caractéristique du canal réactif dans lequel elle progresse ont été validées numériquement.

Il est à noter que pour des valeurs réalistes du paramètre n ($n \approx 10$), on se trouve dans une région du plan $n - L$ où la flamme stationnaire est instable. Cependant, on ne saurait d'une part trop s'attacher à la pertinence du modèle d'un point de vue quantitatif – celui-ci étant volontairement simpliste – et d'autre part, l'apparition d'instabilités ne retire rien aux conclusions de l'étude, à savoir : i) l'existence d'une largeur critique en deçà de laquelle il y a extinction et ii) la possibilité de relier vitesse *moyenne* de propagation dans un canal à sa largeur caractéristique.

À ce point des travaux ici rapportés, on est suffisamment armé pour aborder la modélisation d'un milieu désordonné soumis à un phénomène de combustion,

telle que décrite en introduction de ce mémoire. Il est en effet hors de question d'essayer de traiter un grand réseau de canaux par DNS.

Ce modèle constitue une seconde partie, où l'on commence par évoquer le concept de percolation, les phénomènes de croissance ainsi que la combustion en milieux désordonnés. Ensuite, un second chapitre présente le modèle de percolation retenu pour cette étude, et les résultats obtenus lors de son exploitation.

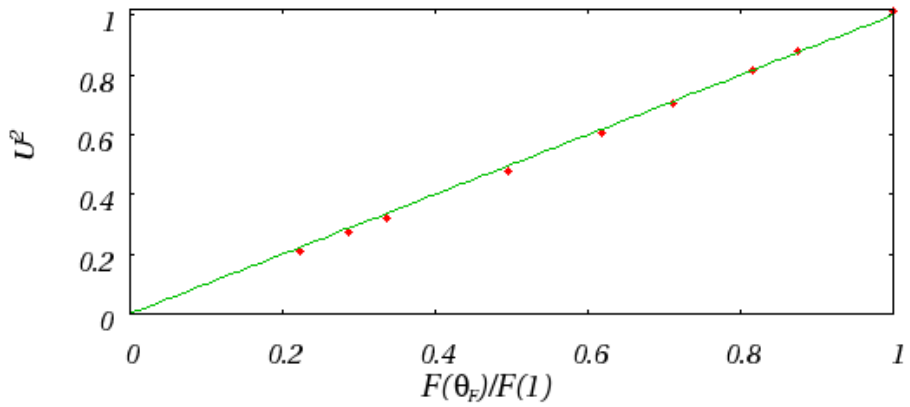


Figure 6.19 – Courbe $U^2 vs F(\theta_F)/F(1)$ pour un front 1D stationnaire. Les valeurs de θ_F sont obtenues en jouant sur les conditions de température et de composition en amont de la flamme. ($\times$) DNS ; (–) modèle à fonction-δ.

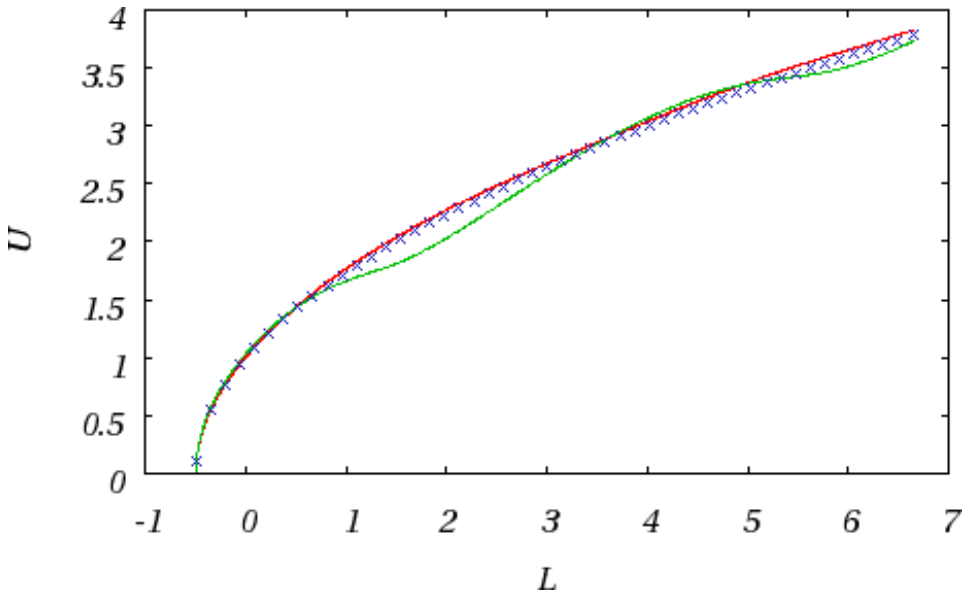


Figure 6.20 – Comparaison du front instable moyen avec le front parabolique issu du modèle à fonction-δ, pour $n = 6$ et $L = 7$. (–) front moyen sur une période ; ($\times$) parabole. Un motif instantanné du front apparaît également, en vert. La vitesse moyenne de la flamme correspond également à celle du front parabolique. C'est le point (■) qui apparaît figure 6.3.

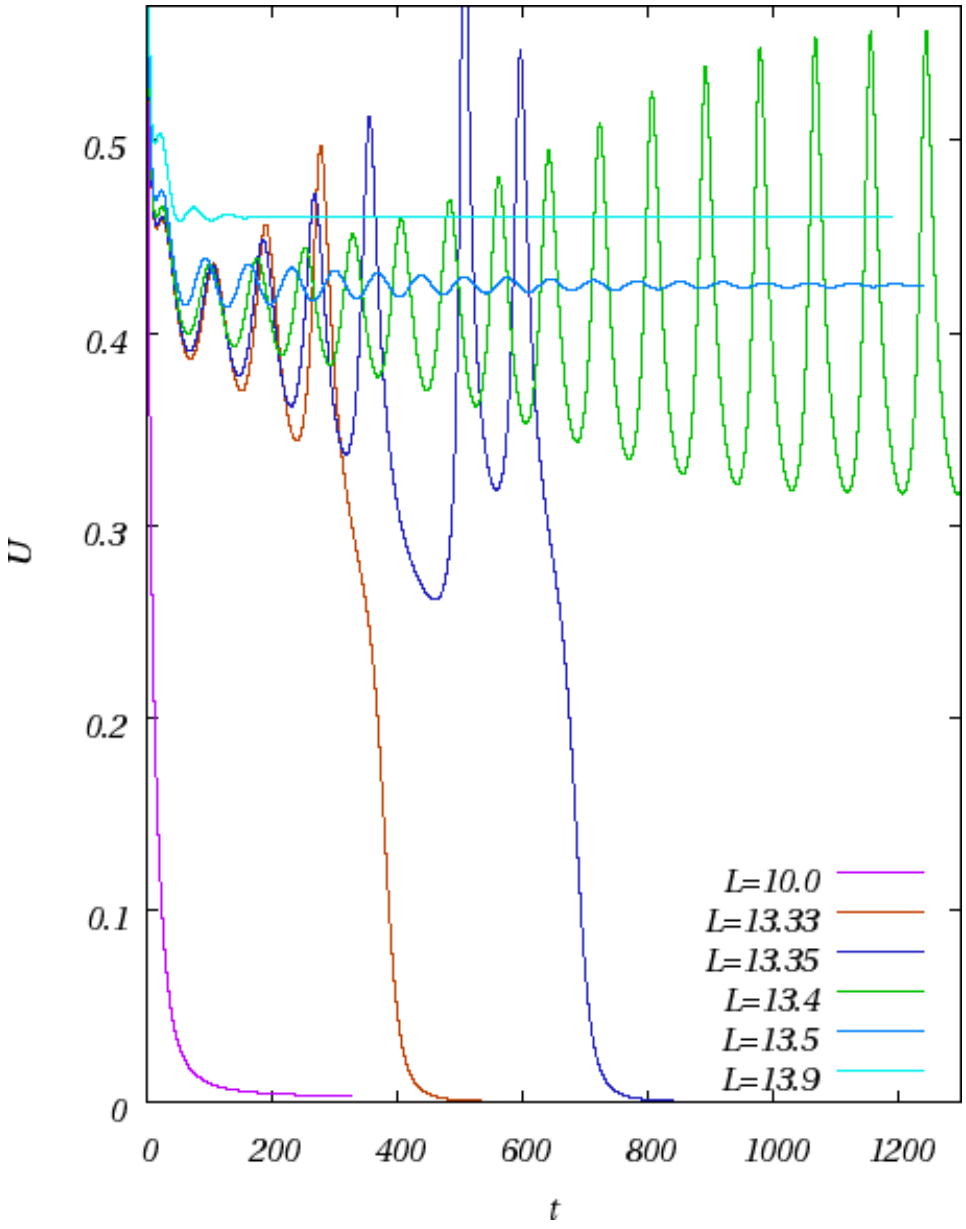


Figure 6.21 – Profils de vitesse au voisinage de l'extinction, pour une réactivité suivant $g_3(z)$ (1/2-cosinus) et $n = 5$. Les courbes définies par $L = 13.33$ et $L = 13.35$ illustrent le comportement du système une fois atteinte la branche basse (instable) de la courbe de réponse statique (la trajectoire dans le plan de phase s'éloigne du cycle limite vers lequel elle tend pour un L légèrement supérieur).

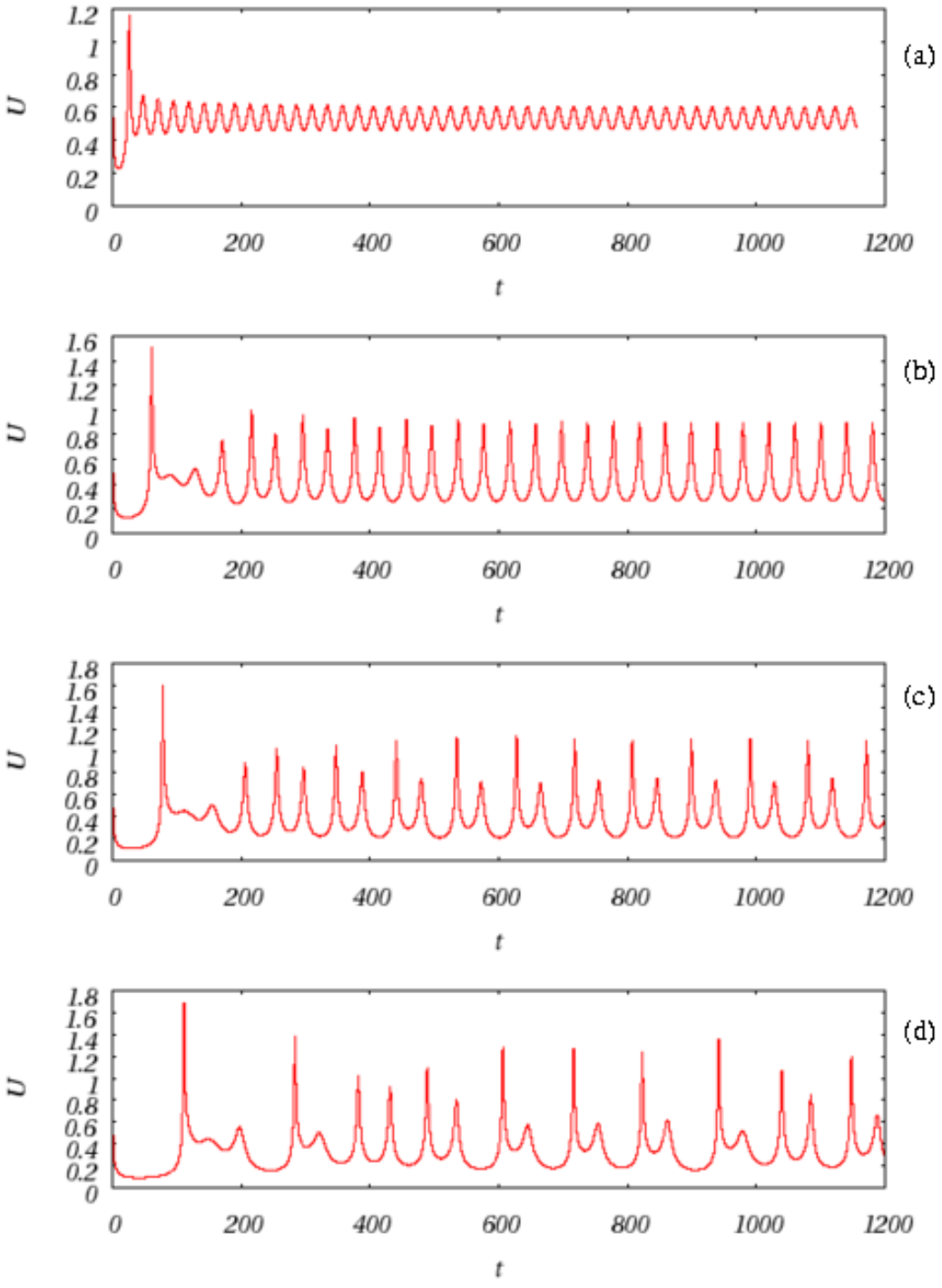


Figure 6.22 – Comportement à proximité de L_Q pour $n = 6$. On note le doublement de période entre b) et c), et peut-être un triplement entre b) et d).

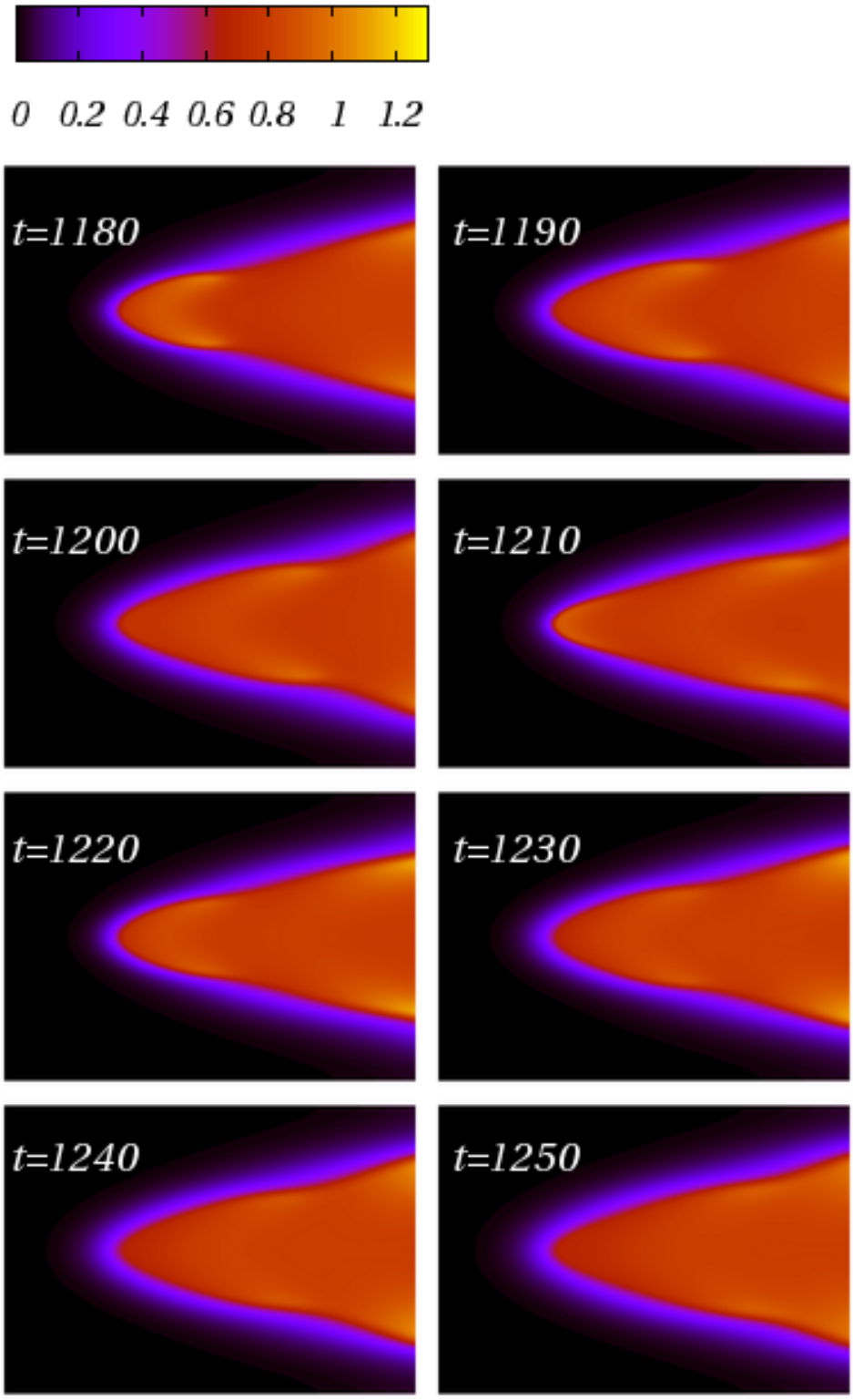


Figure 6.23 – $n = 6$ $L = 6.5$

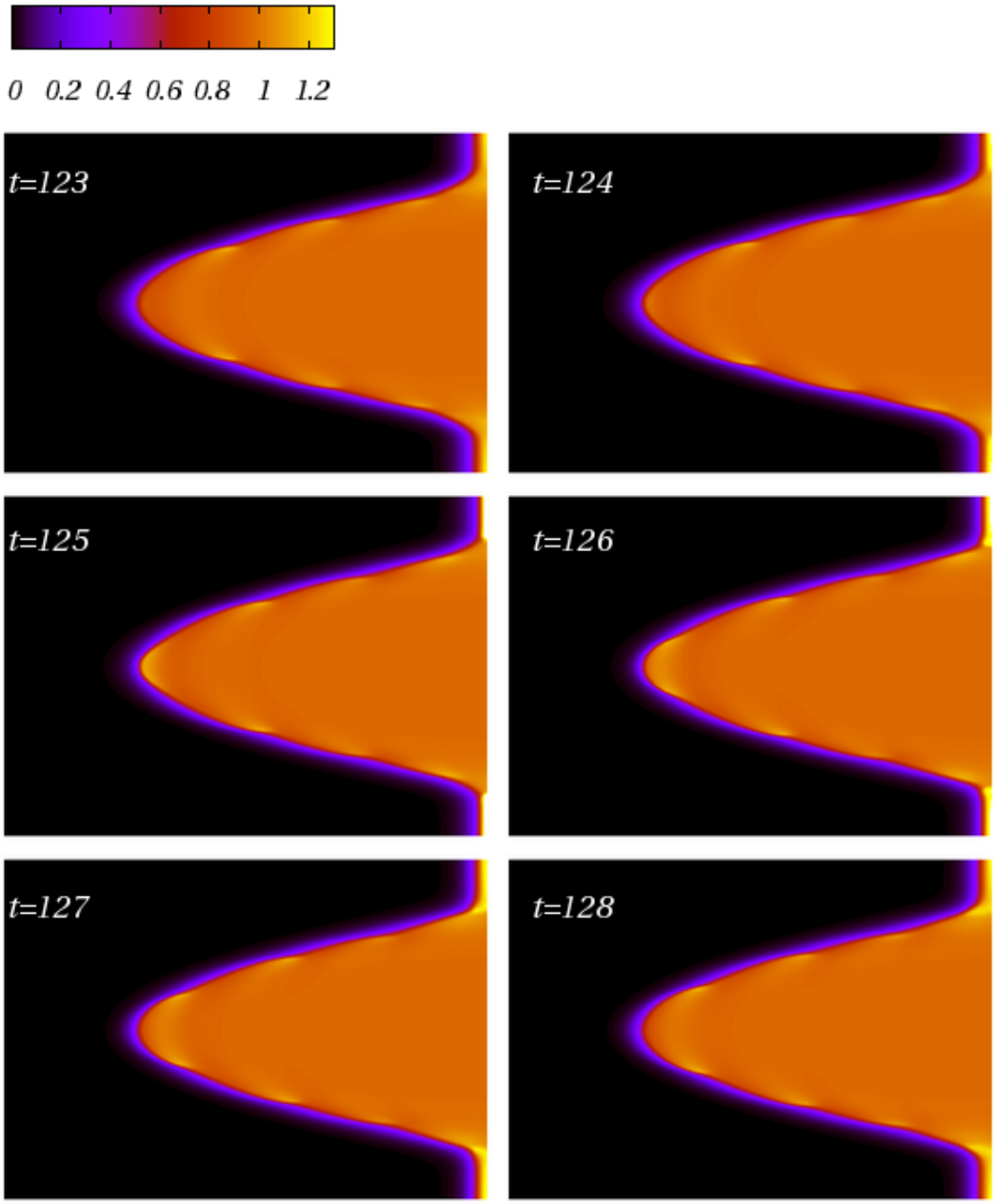


Figure 6.24 – $n = 7$ $Pe = 20$

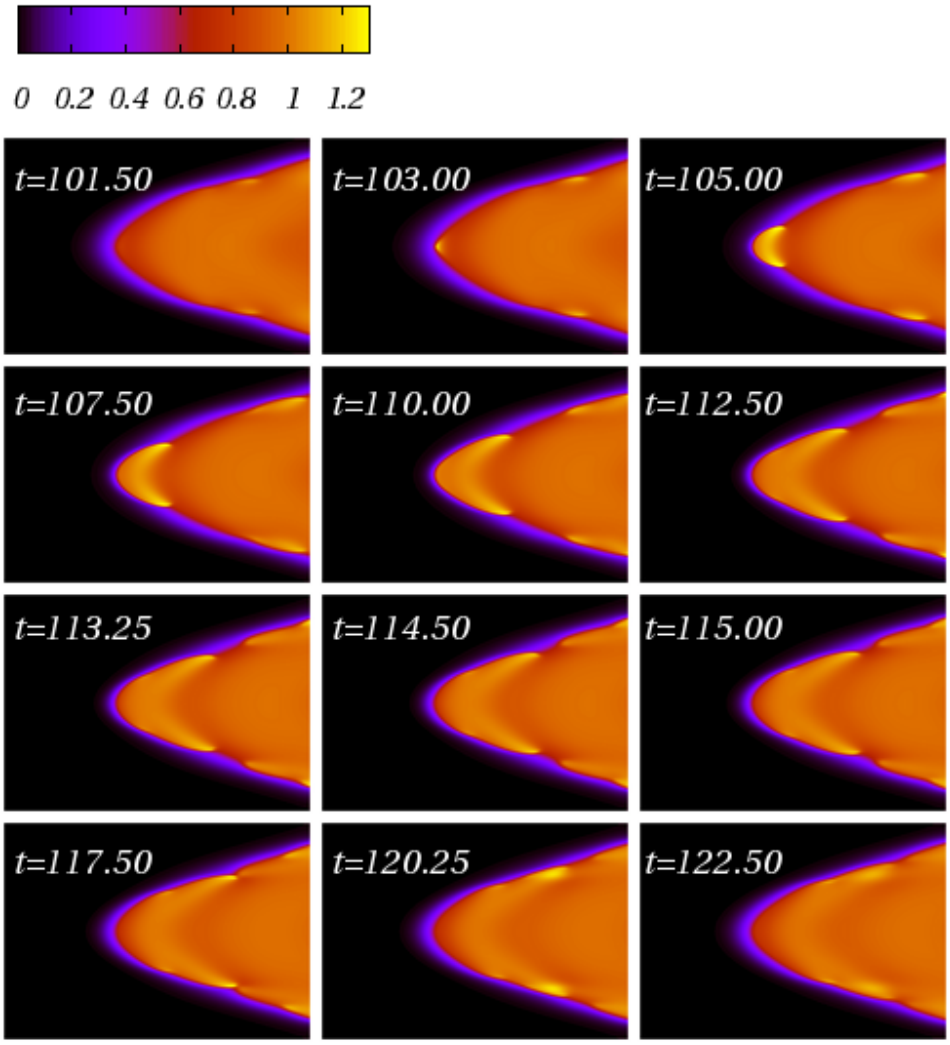


Figure 6.25 – Séquence illustrant l'instabilité pour $n = 8$

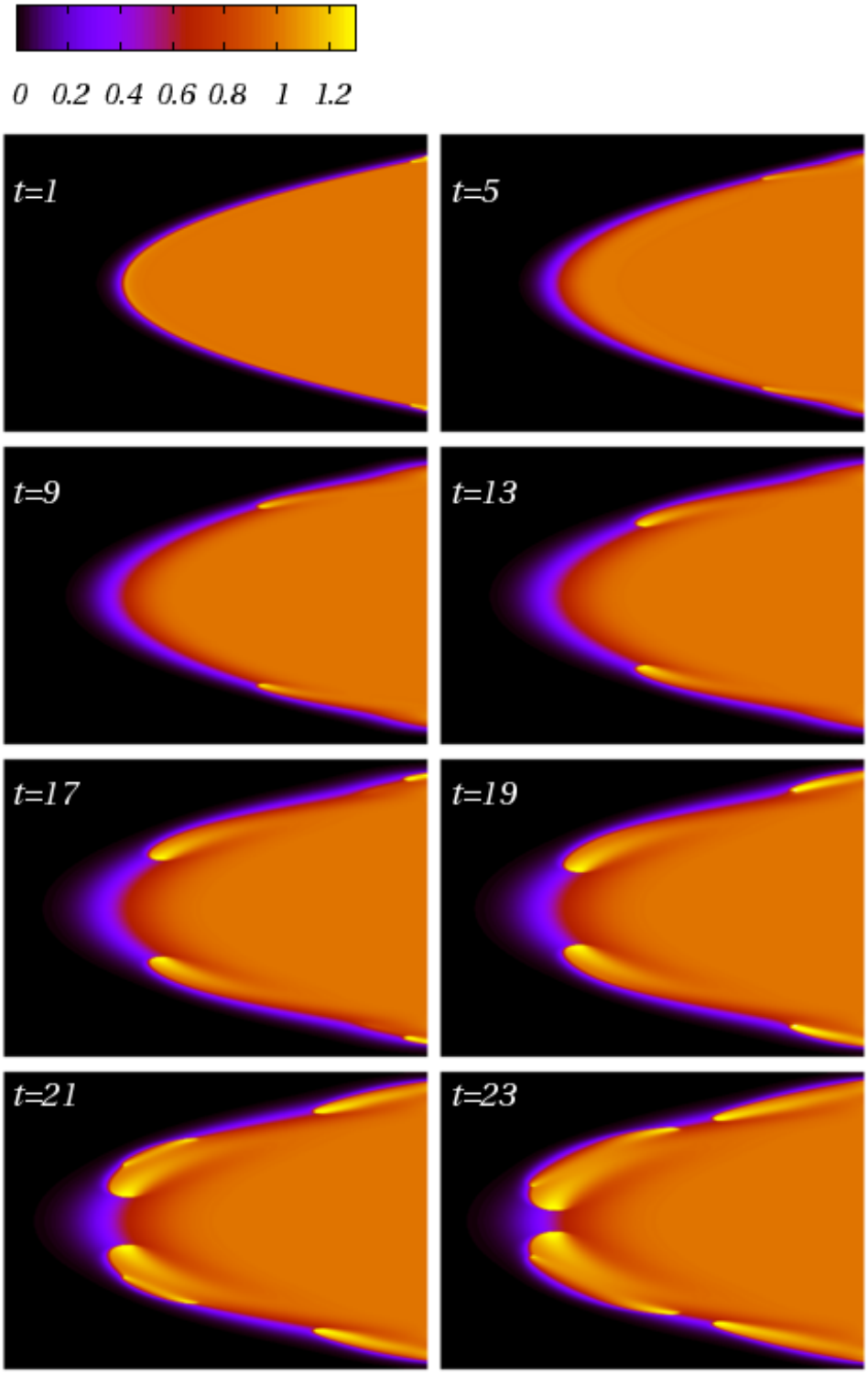


Figure 6.26 – Séquence illustrant l'instabilité pour $n = 9$

Deuxième partie

Flammes en milieux désordonnés

Chapitre 7

Désordre, percolation et flammes en milieux inhomogènes

Sommaire

7.1 Introduction au concept de percolation 116

7.1.1 Qu'est-ce que la percolation ? 116

7.1.2 Aspects statiques de la percolation 119

7.1.3 lois d'échelles et classes d'universalité 124

7.1.4 Conclusion 127

7.2 Modèles dynamiques de percolation appliqués à la combustion 127

7.2.1 Généralités 127

7.2.2 Modèles de type automates cellulaires 128

7.2.3 Modèles déterministes sur réseau aléatoire 129

7.2.4 Conclusion 131

7.3 Conclusion 131

Ce chapitre s'appuie sur des recherches bibliographiques avec deux objectifs : présenter d'une part les notions fondamentales du concept de percolation, et d'autre part évoquer un certain nombre de travaux qui se sont appuyés sur la percolation pour étudier un phénomène de combustion.

Ces deux points font chacun l'objet d'une section propre à leur développement.

7.1 Introduction au concept de percolation

Qu'y a-t-il de commun entre la cuisson d'un œuf [9], l'extraction du pétrole [27], la propagation des feux de forêt [45] et l'étanchéité d'un joint [22] ? Il apparait que tous ces problèmes, bien qu'appartenant à des domaines d'étude très divers, peuvent tous être envisagés au regard d'un même concept qu'est celui de percolation.

La percolation est de ce fait l'objet d'une littérature (très) abondante.

On en présente ici quelques idées fondamentales. Les sources ne sont pas rappelées dans le texte, puisque tout ce qui est évoqué apparaît dans le très intéressant livre de Stauffer et Aharoni [43]. On y trouve une approche physique, à l'opposé d'un autre ouvrage de référence plus difficilement abordable et dû à Grimmet [17], présentant la percolation d'un point de vue mathématique. La synthèse bibliographique menée par Pajot en première partie de sa thèse [36] s'est également révélée instructive.

7.1.1 Qu'est-ce que la percolation ?

Introduction à partir d'examples

On considère ici deux exemples. Soit un bac de fond métallique dans lequel on introduit un mélange homogène de deux poudres, l'une est conductice de l'élécricité, l'autre est isolante. On s'intéresse au caractère conducteur ou non du mélange dans son entier : par exemple, le fond et le couvercle du bac sont métalliques et on applique entre eux une différence de potentiel. La proportion de poudre conductrice est notée p. Lorsque $p = 0$, il n'y a dans le bac que de la poudre isolante : aucun courant ne saurait passer. Lorsque $p = 1$ tout le

milieu est conducteur et un courant peut le traverser. Si l'on part maintenant de $p = 0$ et qu'on étudie des mélanges tels que p augmente d'un mélange au suivant, on constate que l'apparition du caractère conducteur du mélange se fait pour une valeur très précise p_c de p. Pour $p < p_c$ le mélange n'est jamais conducteur, tandis que pour $p > p_c$ il l'est toujours.

Ce caractère conducteur (du mélange dans son entier) correspond à l'existence d'un chemin de particules conductrices permettant de relier les plaques entre lesquelles est appliquée la différence de potentiel. Ce chemin conducteur appartient plus généralement à un ensemble de particules conductrices en contact les unes avec les autres : elles forment un amas, dont on dit qu'il percole – ou qu'il est percolant – lorsqu'il met en "relation" deux bords opposés du milieu.

Soit à présent un autre problème, dans le cadre duquel on s'intéresse à une surface métallique d'apparence plane : elle présente, à une certaine échelle, des irrégularités de surface. On considère une seconde surface, lisse et déformable, que l'on vient appuyer sur la première avec un certain effort F : disons, un joint. Une question que l'on peut aborder au moyen d'un modèle de percolation est celle de l'étanchéité du contact ainsi créé. On devine que pour une pression trop faible du joint sur la surface métallique, les irrégularités de surface du métal ne sont pas complètement comblées par le joint et un fluide peut traverser la jonction. Un modèle de percolation permettra de faire le lien entre l'effort appliqué sur le joint et l'existence d'un amas percolant de micro-cavités entre les deux surfaces (fuite).

La percolation est donc un concept qui s'intéresse à la propagation à grande échelle d'une information (au sens large du terme : un courant éléctrique dans le premier exemple, un fluide dans le second) sur un réseau (réseau de billes dans le premier cas, de cavités dans le second). Le terme "à grande échelle" caractérise plus précisément le fait que l'information puisse se propager aussi loin qu'on le souhaite. Les propriétés d'un système mises à jour via un modèle de percolation sont de nature statistique et probabiliste. La pertinence d'un tel modèle est donc à relier au grand nombre d' "objets" qu'il doit impliquer.

Par ailleurs, la percolation met en jeu des propriétés dont la validité dépasse, dans une plus ou moins grande mesure, le cadre du modèle qui a permis de les

mettre à jour. On parle d'universalité. On revient sur cette remarque afin de la préciser par la suite.

Un phénomène critique

Le caractère brutal – modification soudaine d'une propriété du système en réponse à une évolution continue du paramètre de contrôle (p ou F) – de la transition illustrée ci-dessus fait de la percolation un phénomène critique. Elle est considérée comme le moyen le plus simple par lequel modéliser une transition de phase.

La valeur p_c du paramètre (lequel est désormais toujours noté p) pour laquelle apparaît la transition d'un comportement du système à l'autre est appelée le *seuil de percolation*.

Une grande diversité de modèles

Il existe autant de modèles de percolation que de façons de définir la transmission d'une information sur un support. Ce support est généralement un réseau, mais des modèles hors réseau (*off-lattice*) existent, comme celui de percolation continue. Parmi les réseaux les plus souvent cités, on trouve les réseaux carré[25], triangulaire et hexagonal, ainsi que le réseau dit de Bethe (ou arbre de Cayley). Le réseau de Bethe présente un double intérêt : il permet d'une part de mimer un milieu de dimension infinie, et d'autre part de résoudre certains problèmes de percolation de manière exacte.

Un réseau est de façon générale constitué de sites reliés entre eux par des liens, les uns ou les autres pouvant ne jouer aucun rôle. Il n'est pas nécessaire de considérer des réseaux trop complexes, car nombre de propriétés que mettent à jour les modèles de percolation sont robustes, en ce sens qu'elles ne dépendent pas des détails du problème, mais seulement de quelques paramètres. C'est le cas notamment du seuil de percolation p_c, dont la valeur dépend uniquement de la dimension d du problème (celle du support considéré), et de la connectivité moyenne du réseau.

[25] La forme caractérise ici la maille du réseau et non sa géométrie.

Parmi les modèles de percolation les plus connus, on trouve deux modèles fondamentaux : la percolation de site et la percolation de lien.

En percolation de lien (il s'agit du modèle historique avec lequel est apparue l'étude de la percolation [13]), on considère que l'information est toujours relayée par les sites. Ce sont les liens entre les sites qui vont être passants ou non (coupés).

En percolation de site, on considère que l'information est toujours relayée par les liens. Ce sont les sites qui vont être présents ou non, et ainsi limiter la transmission de l'information à travers le réseau.

Percolation de site et de lien sont deux cas particuliers de la percolation mixte, où sites et liens peuvent faire défaut, chacun selon une probabilité donnée.

Il existe une telle diversité de modèles qu'il semble peu utile de les préciser. Un modèle de percolation sur réseau pourrait se résumer à la donnée des grandeurs suivantes : un espace sous-jacent de dimension d, un réseau de connectivité moyenne c, et une règle permettant de définir des amas.

7.1.2 Aspects statiques de la percolation

Par souci de clarté et parce que le modèle développé dans le chapitre suivant y est lié, les notions présentées maintenant sont illustrées sur le modèle de percolation de lien. Des figures ont été obtenues, lors de la validation du code de percolation bâti pour modéliser la propagation de flammes, qui illustrent[26] certaines propriétés évoquée ici. Ce sont elles qui accompagnent le texte.

On se restreint à un réseau carré de maille carrée et de taille L. Il s'agit d'une grille régulière aux nœuds de laquelle se trouvent des sites – tous présents, mais qui ne jouent ici aucun rôle – qui sont reliés entre eux par des liens verticaux et horizontaux (Fig. 7.1).

On note p la fraction de liens non coupés, c'est à dire capables de relayer localement une information. Cette grandeur est encore appelée paramètre d'ordre, ou paramètre de percolation.

[26] Les figurent ont été obtenues sur un réseau carré en considérant des conditions aux limites périodiques dans la direction verticale.

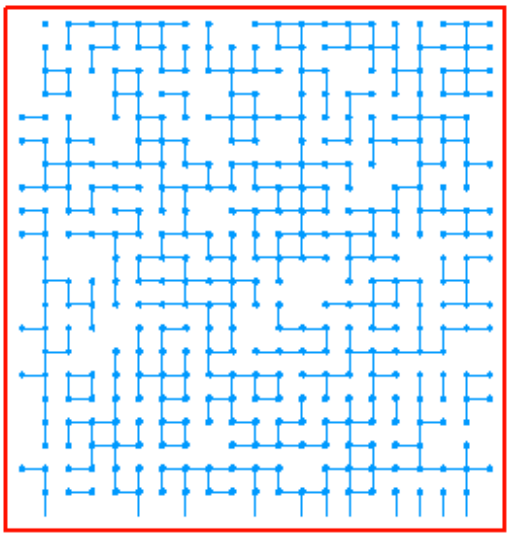


Figure 7.1 – Grille de percolation de lien. $L = 20$ et $p = 0.51$. L'absence de liens horizontaux sur la ligne inférieure du réseau n'est qu'apparente : elle vient de l'utilisation de conditions aux limites périodiques suivant cette ligne.

Seuil et probabilité de percolation

Une caractéristique fondamental du concept de percolation est l'existence d'une valeur seuil p_c ou *seuil de percolation*, telle que le système étudié change "brutalement" de comportement lorsque p atteint et dépasse cette valeur. Pour un modèle de percolation de lien sur réseau de maille carrée le seuil est connu exactement et se situe à $p_c = 1/2$. Sur ce même réseau, le seuil de percolation de site n'est pas connu exactement, et vaut $p_c \simeq 0.592746$.

Pour $p < p_c$ le système ne percole *jamais, en théorie* : il n'existe aucun chemin de liens reliant deux côtés opposés du réseau considéré. Pour $p > p_c$ le système percole *toujours, en théorie*.

Cette transition brutale entre état non percolant et état percolant du système lorsque p atteint la valeur p_c n'existe en fait de façon certaine que lorsque le réseau considéré est de taille infinie. Cette situation idéale n'est donc jamais réalisée et l'on voit apparaitre des *effets de taille finie*, dont la première manifestation est l'"épaississement" du seuil de percolation (voir figures 8.5 et 7.3). Ainsi, la transition n'est pas infiniment brusque en terme d'intervalle de valeurs de p ; elle se fait cependant d'autant plus rapidement que le système

est de taille L grande.

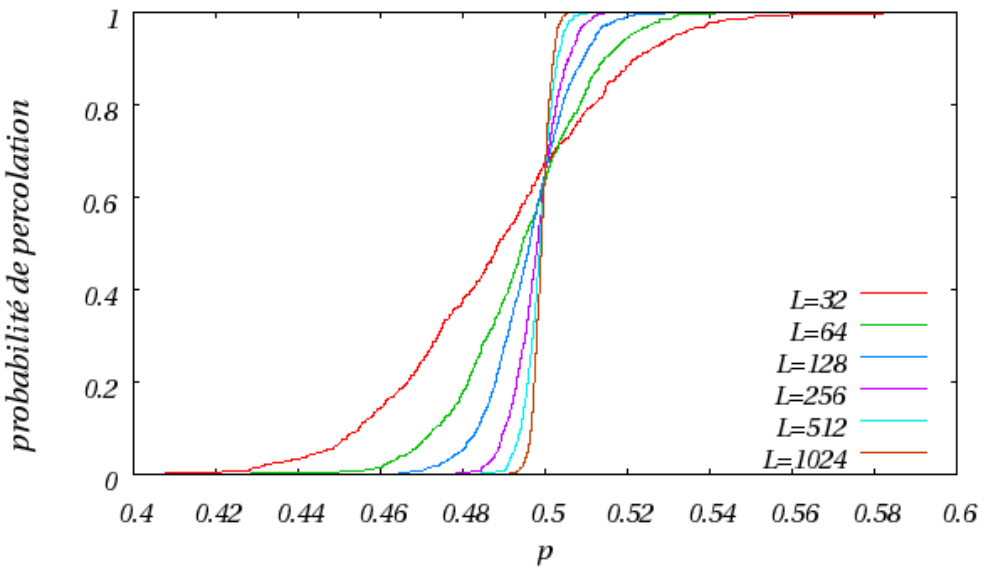


Figure 7.2 – Probabilité qu'existe un amas percolant sur le réseau selon L et p (effets de taille finie).

La probabilité de trouver un amas percolant est donc non nulle, même en dessous du seuil, lorsque le réseau est de taille finie.

Taille des amas et amas de percolation

L'objet de la théorie de la percolation est notamment de dénombrer et caractériser les amas existant au sein du réseau, et plus particulièrement l'amas percolant, s'il existe. Le terme amas désigne un ensemble connexe de liens passants, regroupant donc tous les liens reliés entre eux par un chemin constitué uniquement de liens passants. Les amas sont donc des îlots auxquels reste cantonnée une information qui y prendrait naissance. La propagation à grande échelle d'une information n'est permise qu'au sein de l'amas percolant.

On parle ici de l'amas percolant au singulier : ceci est justifié par l'unicité[27] d'un tel amas, lorsqu'il existe.

[27] Là encore, les effets de taille finie se manifestent, et l'unicité de l'amas percolant n'est certaine que pour un milieu d'extension infinie. Dans le cas contraire, la probabilité que deux amas distincts percolent simultanément est non nulle [41].

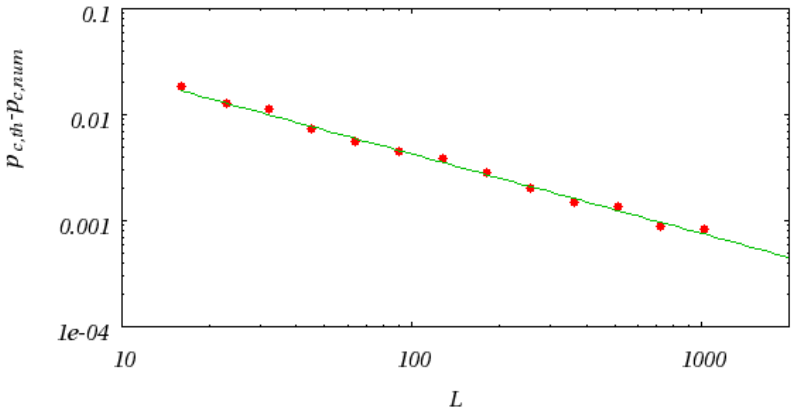


Figure 7.3 – Evolution avec L de l'écart entre la valeur théorique du seuil (ici $p_c = 1/2$) et sa valeur effective lors de simulations numériques du fait des effets de taille finie. (•) simulations Monte-Carlo ; (–) droite de pente $-1/\nu$ avancée par la théorie.

Lorsque $p = 0$, le réseau n'est constitué que de sites : tous les liens sont coupés. Ensuite et pour un réseau de taille fixée, l'ajout aléatoire de liens (ou le passage de l'état non passant à celui de passant) se traduit par une augmentation de p. Si le lien nouvellement ajouté partage un de ses deux sites avec un autre lien passant, il vient contribuer à "grossir" l'amas auquel appartient le lien déjà présent. Sinon, il reste isolé et constitue un amas à lui seul, amas de taille $s = 1$. Ainsi, lorsque p augmente, le nombre d'amas commence par croître en partant de 0 ; puis vient un moment où les liens nouvellement ajoutés ne contribuent plus à créer des amas mais viennent principalement grossir des amas préexistant, puis en viennent à les faire fusionner. Le nombre des amas commence alors à diminuer tandis que leur taille augmente.

Juste au seuil de percolation, le dernier lien ajouté joue le rôle de chaînon manquant, de telle sorte qu'il achève de compléter un chemin reliant – par exemple – les bords gauche et droit du réseau, pour former un amas percolant.

Au delà du seuil (pour $p > p_c$) l'amas percolant continue de croître, et ce sont les "trous" au sein de cet amas qui s'amenuisent petit à petit. Au seuil, l'amas infini présente une structure très lacunaire, avec des trous de toutes les échelles de longueur *accessibles*.

Si le réseau était de taille infinie, l'amas percolant serait infini également. En ce sens, une information peut être transmise sur cet amas aussi loin qu'on aille la chercher. La taille finie du réseau limite évidemment la taille de l'amas percolant.

La percolation, si elle se définit par des modèles très simples, est loin de constituer un problème résolu du point de vue théorique. En outre, les propriétés statistiques du nombre et de la taille des amas ne sont généralement pas connues. Ceci est principalement lié au nombre très rapidement croissant (avec la taille s) de configurations conduisant un ensemble de liens à former un amas de taille s. Ces configurations, appelées animaux, présentent de plus un périmètre qui n'est pas constant pour une valeur donnée de s. Des lois asymptotiquement vérifiées pour les $s \to +\infty$ ont cependant été déterminées (sous forme d'hypothèses non mises en défaut par les calculs numériques).

La taille moyenne des amas (finis) est notée S. Une grandeur souvent étudiée est la probabilité de percolation[28] P_∞. Elle se définit comme la probabilité qu'un lien passant appartienne à l'amas infini. La masse de l'amas percolant, également objet d'intérêt, est notée M. Elle est proportionnelle à la taille de l'amas qu'elle caractérise.

Longueur de corrélation

La longueur de corrélation, notée ξ, représente une distance moyenne entre deux liens appartenant à un même amas, ou encore la taille caractéristique des amas contribuant le plus à la taille S et notamment à sa divergence au seuil. Elle diverge elle-même au passage du seuil, et lorsque $p > p_c$, elle est représentative de la taille des plus grosses lacunarités au sein de l'amas percolant.

On peut la définir à partir de la fonction de corrlation $g(r)$, qui est la probabilité qu'un lien à distance r d'un lien passant soit également passant et appartienne au même amas. La valeur de ξ s'obtient alors par la relation :

$$\xi^2 = \frac{\sum_r r^2 g(r)}{\sum_r g(r)}$$

[28] L'appellation de cette grandeur est trompeuse : il ne s'agit pas de la probabilité de trouver un amas percolant sur le réseau.

Cette longueur de corrélation peut encore s'exprimer en fonction des rayons de giration R_s des amas de taille s, définition héritée de l'étude des polymères.

7.1.3 lois d'échelles et classes d'universalité

Un caractère fractal

Au seuil de percolation, l'amas infini est fractal : sa masse ne varie pas comme L^d mais comme L^D, où l'exposant $D < d$ – sa dimension fractale – généralise la dimension euclidienne à des valeurs non entières [12] et vaut $D = 91/48$ pour $d = 2$ (voir également la figure 7.4). Si l'on forme le rapport L^D/L^d, qui représente la densité de l'amas infini, on constate que celle-ci tend vers 0 lorsque $L \to +\infty$, traduisant le fait que l'amas infini est principalement constitué de trous, dont les tailles correspondent à toutes les échelles de longueur accessibles (figure 7.5).

Plusieurs autres grandeurs caractéristiques des amas de percolation présentent une structure fractale.

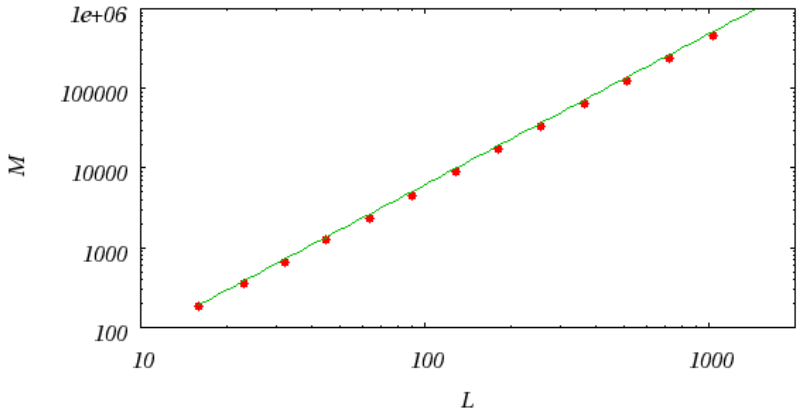


Figure 7.4 – Dimension fractale de l'amas percolant au seuil de percolation. (•) simulations Monte-Carlo ; (–) droite de pente 91/48 avancée par la théorie.

Exposants critiques

En milieu infini, le problème de percolation est caractérisé par une unique échelle de longueur : la longueur de corrélation ξ. Au seuil, ξ diverge et cette

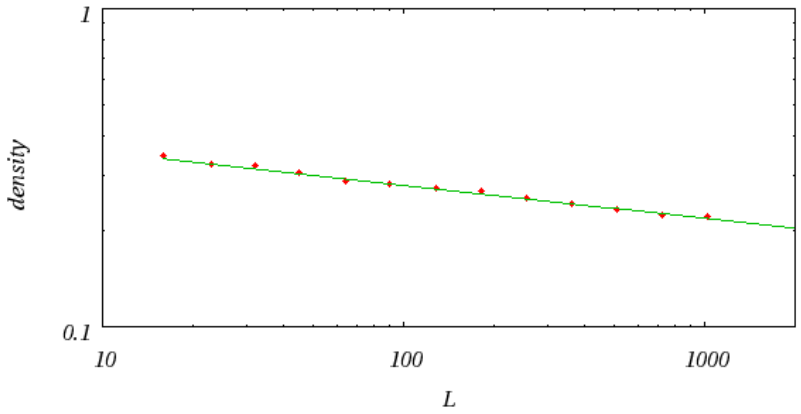


Figure 7.5 – Evolution de la densité de l'amas infini avec L. (•) simulations Monte-Carlo ; (–) droite de pente β/ν avancée par la théorie.

perte de longueur de référence se traduit par l'existence de lois puissances. Ainsi, au voisinage du seuil et en milieu infini, on observe les comportements suivants :

$$\xi(p) \sim |p - p_c|^{-\nu} \qquad p \to p_c \tag{7.1}$$

$$S(p) \sim |p - p_c|^{-\gamma} \qquad p \to p_c \tag{7.2}$$

$$P_\infty(p) \sim |p - p_c|^{\beta} \qquad p \to p_c,\ p > p_c \tag{7.3}$$

Les exposants ν, γ, β sont appelés exposants critiques. À deux dimensions, leurs valeurs sont les suivantes : $\nu = 4/3$, $\gamma = 43/18$, $\beta = 5/36$. D'autres exposants critiques peuvent être définis, et il existe des *relations d'échelles* entre ces exposants, de telle sorte que deux d'entre eux suffisent à les connaître tous.

En percolation, un même modèle est capable de représenter des phénomènes extrêmement divers, appartenant à des domaines d'étude très variés et *a priori* sans rapport aucun. Plus précisément, le comportement du système au voisinage du seuil est indépendant des détails du modèle comme du réseau : seule la dimension d de l'espace sous-jacent le définit, par le biais des exposants critiques. Ceux-ci sont alors dits universels.

Lois d'échelle et taille finie

Si l'on considère une portion carrée de taille l (une "boîte") prise au sein du réseau à p fixé, les propriétés de cette portion vont dépendre de la valeur de l par rapport à celle de ξ. Lorsque $l < \xi$, au sein de la boîte, tout se passe comme si l'on était en milieu infini. On retrouve à cette échelle la structure fractale de l'amas percolant et (si $p > p_c$) des lacunarités de toutes les tailles jusqu'à l'échelle de ξ. Lorsqu'au contraire $\xi < l$, ce qui est notamment le cas lorsqu'on est suffisamment éloigné du seuil et que l'on considère $l = L$, on peut découper le milieu en portions de taille ξ qui se comportent chacune comme le milieu au seuil de percolation.

L'échelle de longueur ξ marque ainsi le passage d'un comportement du milieu à un autre (*crossover*) : aux échelles plus petites que ξ tout se passe comme au voisinage du seuil en milieu infini, alors qu'aux échelles grandes devant ξ, les propriétés du milieu sont similaires à celles du milieu infini à distance du seuil. On voit alors que l'expression "suffisamment loin du seuil" n'a pas de sens en terme de valeurs de p, mais se mesure par le rapport ξ/L.

Au voisinage du seuil et en milieu infini, la relation (7.1) peut être inversée et montre que la distance au seuil vaut :

$$|p - p_c| \propto \xi^{-1/\nu} \tag{7.4}$$

Les arguments développés ici pour signifier que l'état du milieu dépend uniquement du rapport ξ/L sont qualitatifs mais la démonstration peut être faite au moyen de la théorie des groupes de renormalisation.

Les lois en puissance valables au voisinage du seuil en milieu infini deviennent un cas limite de lois d'échelle plus générales permettant d'incorporer les effets de taille finie. Ces lois font intervenir des fonctions dites d'échelles ne dépendant que du rapport ξ/L, qui est souvent réécrit d'après (7.5) sous la forme $(p-p_c)L^{1/\nu}$. Si l'on note Ψ_X la fonction d'échelle associée à une grandeur X, la loi d'échelle suppose l'existence d'un exposant χ tel que :

$$X(p, L) = |p - p_c|^{-\chi} \Psi_X \left((p - p_c) L^{1/\nu} \right) \tag{7.5}$$

7.1.4 Conclusion

La percolation est un concept très simple dans sa définition. Il est doublement intéressant dans la mesure où, d'une part, il permet de mettre à jour des lois dont la validité dépasse largement les détails du problème modélisé, et d'autre part, les comportements et propriétés qui en résultent sont d'une grande richesse.

La simplicité de ces modèles n'implique pourtant pas qu'on sache les résoudre de façon exacte, bien au contraire. Les valeurs des seuils de percolation, ne serait-ce qu'elles, ne sont connues de manière exacte que pour de rares cas particuliers.

7.2 Modèles dynamiques de percolation appliqués à la combustion

7.2.1 Généralités

Les premières tentatives d'application de la percolation à des problèmes de combustion concernent essentiellement les feux de forêt et remontent, semble-t-il, aux années 80 [2]. Ce domaine d'application fait de loin l'objet du plus grand nombre d'études liant combustion et percolation. En dehors de cela, on ne trouve qu'une matière encore restreinte. Certains régimes de combustion des brouillards [26] de gouttelettes invitent à considérer un amas percolant de gouttelettes enveloppées par une flamme. La combustion dans les milieux solides désordonnés est également l'objet de plusieurs publications [39]. On peut finalement évoquer des modèles de combustion lente de feuilles de papier [31], mais ces dernières publications s'intéressent plus au front de flamme en tant que phénomène de croissance.

L'article de Rabinovich et al. [39] propose une revue des applications faites de la percolation à des problèmes de combustion. On sait aujourd'hui, d'après ces auteurs, que les caractéristiques de fronts de combustion se propageant en milieux inhomogènes et leurs conditions de propagation peuvent dans une large mesure être déterminées par la structure interne du système, laquelle est

aléatoire pour la plupart des milieux hétérogènes.

Parmi les études évoquées ici ou du même type, les études numériques se distinguent principalement selon deux types : beaucoup font appel à des modèles d'automates cellulaires, quelques autres s'attachent à résoudre des équations de conservation avec pour support un réseau aléatoire. C'est sur cette distinction qu'on développe certaines des applications évoquées.

7.2.2 Modèles de type automates cellulaires

La majorité des modèles dynamiques de percolation qui s'appuient sur des simulations numériques font appel à des automates cellulaires. Ces modèles correspondent à la donnée d'un réseau dont les éléments peuvent prendre un certain nombre d'états, lesquels évoluent au cours du temps selon une loi de "contagion" donnée. L'amas accessible à la contagion est alors envahi petit à petit, et du même coup révélé.

Ainsi, pour étudier la propagation des feux de forêt, un des premiers modèles [34] considère un réseau carré dont on allume un site. D'un pas de temps à l'autre, le feu se transmet aux sites plus proches voisins avec des probabilités données. Le réseau comporte alors des arbres non brûlés, en train de brûler, brûlés, ou préchauffés (les plus proches voisins). Un arbre atteint par le feu est considéré comme brûlé en un seul pas de temps. Ce type de modèle s'est enrichi au fil du temps, pour prendre en compte divers aspects, comme par exemple l'apparition ou la réapparition de matière combustible sur un site vierge ou brûlé [1], ou encore la prise en compte de temps caractéristiques comme le temps nécessaire pour initier la combustion d'un site et la durée de sa combustion [11].

Dans la combustion non prémélangée d'un brouillard de gouttelettes combustibles dans un milieu oxydant gazeux, divers régimes de combustion ont été mis à jour [26] : combustion de gouttelettes isolées, combustion d'un ensemble de goutelletes et combustion "percolante". La percolation a semble-t-il permis, par une approche théorique, une description unifiée de la combustion des brouillards. Dans [46], un modèle numérique de percolation – plus complexe qu'un simple automate cellulaire – a été utilisé pour mettre à jour le

mécanisme d'apparition de la combustion de groupe (i.e. percolante) dans un brouillard de combustible peu volatil. Le modèle utilise un réseau 3D régulier de sites (les gouttelettes) et définit une relation entre ces sites, en terme de distance inter-gouttelettes, de telle sorte que par propagation inter-gouttelettes (la combustion d'une goutellette amorce l'évaporation de la goutellette plus proche voisine qui libère le réactif nécessaire à l'avancée de la flamme, laquelle enveloppe alors les deux gouttelettes) une flamme se propage de proche en proche pour envelopper tout un amas. Un calcul est alors effectué pour déterminer la forme de la flamme. Si celle-ci englobe des sites qui n'appartenaient pas à l'amas juste envahi, ces sites sont inclus dans l'amas et la flamme est recalculée, jusqu'à ce qu'aucune gouttelette suplémentaire ne vienne subir l'influence de la flamme.

7.2.3 Modèles déterministes sur réseau aléatoire

Dans l'optique d'établir des modèles moins simplificateurs que ceux précédemment évoqués, quelques auteurs ont basé leurs modèles sur des équations de bilan d'énergie et de concentration en combustible. Ils résolvent cependant ces équations pour un milieu qui prend la forme d'un réseau de percolation, constitué de sites combustibles ou inertes dans une proportion donnée.

Le premier de ces modèles [37][38] considère ainsi un réseau 2d carré de sites avec une concentration moyenne p répartie de façon inhomogène en une proportion p de sites de concentration 1, le restant des sites du réseau ayant une concentration nulle en réactif. Les auteurs présentent ce modèle comme un modèle de feux de forêt. Un système de réaction-diffusion est résolu sur ce réseau, le réactif ne diffusant pas, le terme source étant en $T^{3/2}\exp(-1/T)$ et le bilan d'énergie comportant un terme de pertes en $K(T-T_0)$, avec un T_0 très faible ($10K$) pour réduire la portée du front thermique (pour des raisons pratiques). Les auteurs obtiennent un comportement critique avec un seuil de $p_c \simeq 0.19$ et un exposant critique $\phi \simeq 0.46$ pour la vitesse du front au voisinage du seuil (le front étant défini par la position $h(x,t)$ des maxima de température). Ils confrontent leurs résultats à une théorie de champ moyen qui donne une comparaison satisfaisante, et attribuent ce fait aux effets de

longue portée dus à la diffusion de la chaleur. Ils s'intéressent finalement aux propriétés du front en terme de croissance et rugosité de l'interface et trouvent que sa description montre le même comportement que celui décrit par le modèle Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [28].

Rabinovich et Grinchuk [39] reprochent au modèle précédent, entre autres, de ne pas considérer des valeurs réalistes de certains paramètres. Ils insistent sur l'importance de mettre à jour l'impact du désordre structurel du milieu sur la combustion et de relier le phénomène de percolation aux conditions limites de survie d'une flamme, en terme de pertes de chaleur et de concentration en réactif. Ils proposent un modèle de combustion en milieu solide, construit à l'origine sur l'observation des phénomènes intervenant en SHS (*Self-propagating high-temperature synthesis*), et pouvant tenir compte de pertes énergétiques et des transferts de chaleur entre particules combustibles. Ils bâtissent leur modèle autour de trois paramètres : un rapport d'échelle entre l'épaisseur du front et la taille caractéristique des particules, un paramètre traduisant l'efficacité des transferts de chaleur entre particules, et une température d'allumage. Ils étudient alors deux situations : une concentration importante de particules et des pertes thermiques élevées, puis le cas d'un milieu adiabatique comprenant une faible concentration de particules mais dont la combustion est très exothermique. Les auteurs s'attachent principalement à mettre en évidence l'existence d'une combustion de type percolante lorsque les conditions de survie de la flamme sont limites. En dehors de telles conditions, ils caractérisent la combustion par l'adjectif "frontale", c'est à dire que le milieu est consommé dans toute sa largeur plutôt que selon un amas privilégié[29]. Ils obtiennent d'une part que pour des concentrations en réactif faibles ou modérées, le problème peut être ramené à celui, mieux connu, de la percolation sur un ensemble de disques (dont le rayon R serait le rayon de la zone d'allumage d'une particule combustible). D'autre part, leur modèle met en évidence un saut de l'intensité critique

[29]La distinction entre combustion percolante et frontale n'est pas évidente et demande peut-être à être précisée. La combustion frontale n'est-elle pas une combustion percolante dont l'amas est simplement autre et plus important ? Tout ne dépend-il pas de la définition des "relations" entre particules (la portée de leurs interactions), permettant de définir des amas ?

des pertes de chaleur à la traversée du seuil de percolation, ce qu'ils évoquent comme un éventuel moyen de mettre en évidence un régime de combustion percolante expérimentalement.

7.2.4 Conclusion

On constate qu'un nombre croissant d'auteurs considèrent la percolation comme une manière possible d'envisager des problèmes de combustion en milieu inhomogène, et que le caractère critique du phénomène de combustion en milieu désordonné est acquis. Bien que visiblement peu nombreuses, des études expérimentales existent, qui confirment ce caractère critique [44].

Il semblerait qu'il y ait certaines difficultés [39] à mettre en évidence une combustion de type percolante expérimentalement, en dehors d'expériences modèles, du moins en ce qui concerne la combustion en milieux solides hétérogènes.

7.3 Conclusion

Ce chapitre illustre la grande diversité de modèles de percolation qui peuvent être construits. Le concept de percolation est un outil simple mais efficace pour révéler l'importance d'inhomogénéités structurelles d'un support – au sens général – sur la circulation d'une "information" sur ce support, ou encore sa "contagion" progressive.

Une étape clé dans l'établissement d'un modèle de percolation est la définition des relations par lesquelles on peut définir des amas. Ces relations sont à relier à la portée des interactions mises en jeu entre les éléments considérés (arbres, gouttelette, particules), portée qu'il n'est pas simple de contrôler, comme le soulignent certaines études expérimentales.

La plupart des modèles évoqués ici, dans l'application de la percolation à la combustion, sont des modèles considérant un réseau de sites.

L'approche que l'on propose dans le chapitre suivant s'appuie au contraire sur l'existence, au sein du milieu inhomogène considéré, d'un réseau sous-jacent de liens : des canaux, définis par les inhomogénéités de réactivité et/ou de

concentration en réactif, tels qu'étudiés en première partie de ce mémoire.

On présente maintenant un modèle dynamique de percolation de lien, du type automate cellulaire.

Chapitre 8

Flammes en milieu désordonné : un modèle de percolation

Sommaire

8.1 Introduction 135

8.2 Modèle de propagation d'une flamme sur un réseau de lien 135

8.2.1 Choix du modèle 135

8.2.2 Modèle et notations 137

8.2.3 Aspects numériques 141

8.3 Premières remarques et observations qualitatives 145

8.3.1 Régime sous-critique : $p < p_c$ 145

8.3.2 Au voisinage du seuil 146

8.3.3 Cas particulier où $p = 1$ 147

8.3.4 Obstacles s'opposant à l'avancée du front lorsque $p < 1$ 148

8.3.5 Direction de propagation et corrélations transversales 149

8.3.6 Choix des définitions du front et de la vitesse moyenne 150

8.4 Résultats des simulations Monte Carlo 151

8.4.1 Caractérisation de la forme du front 152

8.4.2 Régime de saturation 165
8.4.3 Comportement au voisinage du seuil : $p \to 1/2$. 178
8.4.4 Cas limite du désordre faible : $p \to 1$ 183
8.5 Synthèse et conclusion 185

8.1 Introduction

À présent que le comportement d'une flamme se propageant le long d'un canal unique est connu (en terme d'extinction notamment), on s'intéresse à la propagation d'une flamme sur un réseau de canaux. Sont alors mis en jeu des comportements collectifs.

Il est inenvisageable – on a pu le voir lors de la première partie – de se confronter à ce problème de manière directe. On utilise ici un modèle de percolation, abordant ainsi l'étude d'un point de vue statistique. Ce choix d'un modèle sous-jacent de percolation est discuté en première section du chapitre.

On a pu remarquer précédemment la grande diversité de comportements que mettent en jeu ces modèles. L'étude de la propagation d'une flamme sur un réseau de percolation hérite naturellement de cette diversité, à laquelle s'ajoutent des caractéristiques dynamiques.

8.2 Modèle de propagation d'une flamme sur un réseau de lien

8.2.1 Choix du modèle

Le concept de percolation présente de nombreux intérêts qui justifient de l'avoir choisi pour cette étude, et que l'on précise maintenant.

D'une part, on s'intéresse au comportement d'un milieu (ici réactif) selon son degré de désordre, et c'est exactement ce que permet un modèle de percolation en jouant sur le paramètre p.

Mais qu'entend-on au juste ici par degré de désordre ? Il peut être intéressant pour préciser cela de considérer un milieu homogène dans lequel une flamme peut se propager. Si l'on distribue aléatoirement un grand nombre de points dans ce milieu et qu'on y injecte une quantité variable d'inhibiteur, empêchant localement la réaction chimique de combustion, des poches imbrûlables vont apparaître (Fig. 8.1). Plus on va injecter d'inhibiteur et plus ces poches seront de taille importante, jusqu'à se rencontrer et fermer un à un les passages permis à un éventuel front de flamme. Lorsqu'on évoque ici le

degré de désordre du milieu, c'est à un phénomène de même principe que l'on renvoit : un milieu initialement favorable à la propagation d'une flamme et qu'un désordre (quantifié par un paramètre $(1-p)$) rend de moins en moins favorable.

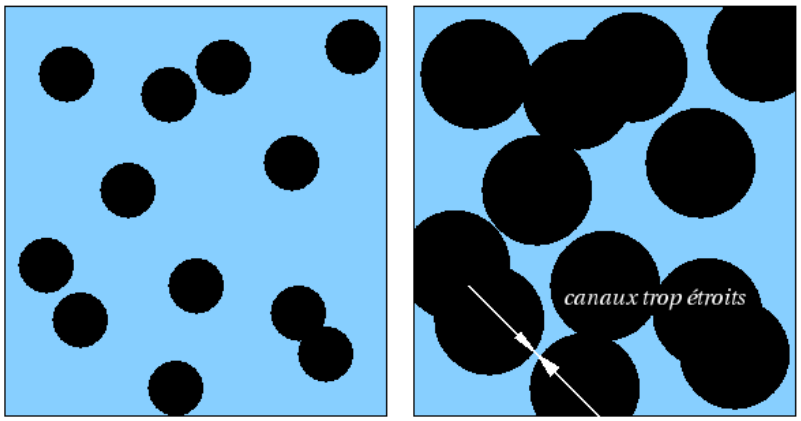


Figure 8.1 – Milieu réactif dans lequel croîssent des poches non inflammables (en noir).

On imagine aisément qu'un milieu trop désordonné, présentant peu de zones où le réactif est à la fois suffisamment concentré et délimite des canaux suffisamment larges, ne saurait permettre la propagation d'une flamme à grande échelle. Dans le cas contraire, où le milieu serait essentiellement constitué de zones suffisamment riches en réactif, une flamme s'y propagerait aussi loin qu'on aille la chercher. Si l'on considère l'ensemble formé par ces régions qui permettent de maintenir l'activité d'une flamme, on dispose d'une variété d'amas de tailles diverses. Le parallèle avec la percolation est alors immédiat. La propagation d'une flamme est de type "tout ou rien", dans la mesure où s'il n'y a rien ou pas suffisament à brûler pour la maintenir et la propager, elle s'éteint. Si l'amas réactif ne percole pas, aucune flamme ne pourra le traverser totalement.

Ainsi, en jouant sur le degré d'inhomogénéité du milieu, on peut restreindre l'ensemble "conducteur" de la flamme jusqu'à ce qu'il ne percole plus, auquel cas la flamme ne peut plus traverser le milieu et sa vitesse moyenne devient "brutalement" nulle : on est en présence d'un phénomène critique. Or le concept de percolation permet de construire les modèles les plus simples reproduisant

un comportement critique.

Finalement, c'est la faculté des modèles de percolation à permettre la mise à jour d'une part d'universalité contenue dans un problème qui les rend tout à fait intéressants. Ce caractère universel, qui s'exprime à travers des lois d'échelles d'exposants universels (pour une classe donnée de problèmes), doit permettre l'obtention de résultats signifiants bien qu'obtenus depuis un modèle construit sur de nombreuses simplifications. Par exemple, à dimension d'espace d fixée, le seuil de percolation ne dépend pas des détails du réseau sur lequel le modèle est bâti, mais seulement de sa connectivité moyenne. Ainsi, les résultats de l'étude d'un modèle de percolation sur réseau carré dépassent largement le cadre de ce seul réseau. Mieux : les exposants critiques sont eux totalement *indépendants du réseau*. Si l'on est à même de déterminer le seuil de percolation p_c d'une façon ou d'une autre pour un réseau plus réaliste, le comportement au voisinage du seuil – bien qu'obtenu à partir d'un autre réseau – devrait pouvoir s'appliquer.

Ainsi, il n'est pas utile de compliquer le modèle à construire en s'appuyant sur un réseau complexe. Un réseau simple est suffisant pour une première détermination du comportement de flammes initiées en milieu désordonné.

8.2.2 Modèle et notations

On considère un réseau de liens régulier, de maille carrée et de forme rectangulaire. Les sites ne jouent aucun rôle dans le modèle, mais sont introduits également, pour désigner les nœuds de la grille auxquels ils sont situés. Ce réseau est constitué de L_1 liens selon la ligne d'allumage. On considère à partir de maintenant que cette ligne est celle des sites localisés sur le bord gauche du réseau (Fig. 8.4).

Afin de réduire les effets de taille finie, on considère un réseau périodique suivant la direction verticale : les sites du bord inférieur sont les mêmes que ceux du bord supérieur. De ce fait, le nombre de sites par colonne est également L_1.

La direction perpendiculaire – horizontale, c'est-à-dire la direction de propagation – compte quant à elle $L_2 > L_1$ liens et n'est pas périodique. Il

s'y trouve donc $(L_2 + 1)$ sites, si bien que le nombre total de sites vaut $N = L_1(L_2 + 1)$, tandis que le nombre total de liens impliqués s'écrit $M = L_1(2L_2 - 1)$. Les sites et les liens du réseau sont indexés respectivement par $s \in [0, N-1]$ et $b \in [0, M-1]$.

On désigne comme précédemment par p la probabilité qu'un lien, pris au hasard sur le réseau, soit non coupé. On rappelle que le seuil de percolation vaut $p_c = 1/2$ pour un modèle de percolation de lien sur le réseau considéré.

La donnée de p suffit à définir si oui ou non une flamme va se propager à grande échelle, c'est-à-dire si le milieu réactif percole ou non. C'est une propriété géométrique et donc statique. D'autres propriétés, par contre, comme la vitesse moyenne de propagation, sont des propriétés dynamiques. Elles dépendent de la vitesse de propagation des flammes le long de chaque lien. On peut donc considèrer diverses situations à partir d'un même modèle géométrique sous-jacent (ici un modèle de percolation de lien). En pratique, la donnée d'un milieu réactif désordonné correspond à celle d'un ensemble de canaux de largeurs variées, suivant une certaine distribution. Celle-ci étant choisie, les vitesses de propagation de la flamme suivant chacun des canaux sont imposées par des courbes $(U - L)$ semblables à celles obtenues dans la première partie du mémoire. Deux cas sont étudiés par la suite : le cas général ci-dessus, particularisé à une distribution $d(l)$ donnée, et le cas particulier où la vitesse de flamme est indépendante du lien sur lequel elle se propage. Ce dernier revient soit à considérer la même distribution $d(l)$ mais une courbe $U - L$ de type "tout-ou-rien" (Fig. 8.3), soit à considérer des canaux tous identiques.

Ces deux cas correspondent à deux modèles. L'un est appellé Modèle à Vitesse Constante (MVC) et l'autre Modèle à Vitesse Variable (MVV). La distribution des largeurs de canaux considérées alors a pour densité de probabilité $pdf(l)$, que l'on définit par une Gaussienne centrée sur une valeur positive et déformée de façon à s'annuler pour $l \leq 0$ (Fig. 8.2) :

$$pdf(l) = (1-p)\delta(l) + \lambda\, p_+(l) \tag{8.1}$$

$$p_+(l) = \begin{cases} pdf_+(l) & \text{si } l \geq L_Q \\ 0 & \text{si } l < L_Q \end{cases} \tag{8.2}$$

avec

$$pdf_+(l) = \begin{cases} \frac{A(\sigma,m)}{m!} \cdot l^{2m+1} e^{-\frac{2m+1}{2\sigma^2}l^2} & \text{si } l \geq 0 \\ 0 & \text{si } l < 0 \end{cases} \tag{8.3}$$

$$A(\sigma, m) = 2\left(\frac{2m+1}{2\sigma^2}\right)^{m+1} \tag{8.4}$$

Les largeurs des canaux sont, pour une fraction $(1-p)$ d'entre elles, automatiquement coupées (Dirac centré sur une valeur strictement inférieure à L_Q). Le paramètre λ est ajusté de telle sorte que la probabilité d'obtenir une largeur supérieure à une valeur L_Q donnée soit égale à la probabilité p qu'un lien soit viable. Si l'on se donne une courbe $(U-L)$ – ce qui fixe la valeur de L_Q – on est à même, grâce à cette distribution des largeurs des liens, de construire un réseau dont le paramètre d'ordre vaut p également choisi. La valeur de λ correspondante s'écrit :

$$\lambda = \frac{1}{1 - F_+(L_Q)} p \tag{8.5}$$

où F_+ est la fonction de répartition associée à pdf_+. Elle vaut :

$$F_+(l) = J_m\left(\frac{2m+1}{2\sigma^2} l^2\right) \tag{8.6}$$

et $m! J_m(x) \equiv \gamma(m+1, x)$ ($\gamma(a,x) = \Gamma(a) - \Gamma(a,x)$ étant la partie complémentaire de la fonction gamma incomplète).

La largeur de canal la plus probable vaut σ, que l'on a prise égale à $2L_Q$ par la suite. Le paramètre m permet de jouer sur la largeur de la pdf.

On note l_b la largeur du lien indexé par b, et u_b la vitesse à laquelle une flamme le parcourant se propage. On considère par ailleurs que tous les liens sont initialement de même longueur inflammable L^0.

On allume alors une flamme sur le bord gauche du réseau, de façon à étudier sa propagation. Les propriétés caractérisant celle-ci sont évaluées au moyen de la méthode de Monte Carlo. Dans le cadre du modèle MVC, l'unité de temps est le temps δt nécessaire pour consommer un lien à vitesse $u_b \equiv 1$. Le pas de temps du modèle vaut exactement δt. Après chaque pas de temps – et donc chaque fois qu'on l'observe – le front d'avancement de la flamme se trouve alors toujours situé au niveau de sites. Il n'en va pas de même dans le cas du modèle MVV, où le front n'a aucune raison d'avoir consommé plusieurs liens

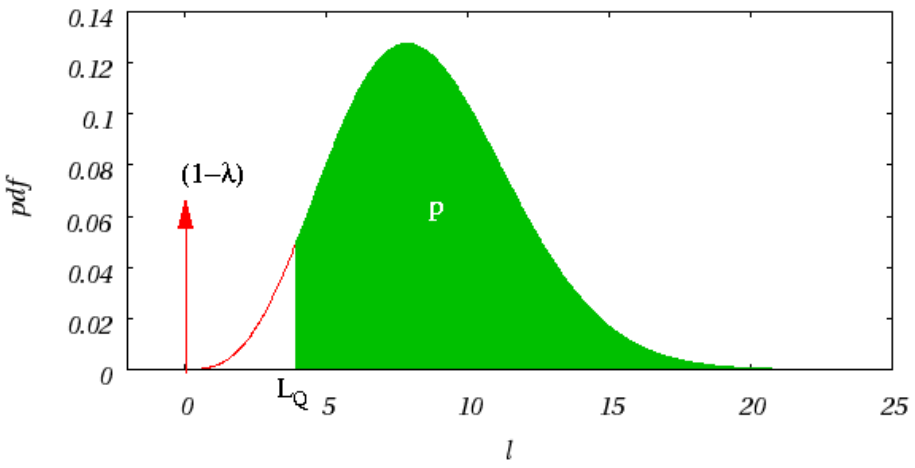


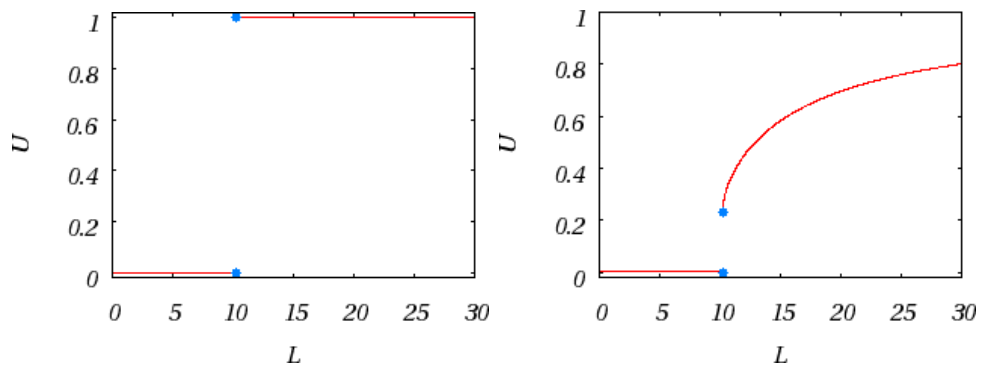
Figure 8.2 – Densité de probabilité correspondant à la définition (8.1), pour $m = 1$ et $\sigma = 2L_Q$. L'aire représentée en vert vaut exactement p.

à la même vitesse, ni donc d'arriver sur plusieurs sites au même moment. Cela vaut quelque soit le pas de temps choisi. Il est pris identique pour les deux modèles.

La règle de transmission de la flamme d'un lien à d'autres est également à définir et peut permettre de simuler des phénomènes divers. Ici, on ne considère que des interactions dites de plus proches voisins : lorsqu'une flamme achève de brûler un lien et arrive alors au niveau d'un site, elle se transmet à tous les liens partant de ce même site, et uniquement[30] à ces liens.

Les grandeurs moyennes (en moyenne d'ensemble) que l'on observe par la suite sont essentiellement les suivantes : la position du front $b(t)$ (une définition précise en est donnée ultérieurement), sa vitesse $U(t) = db(t)/dt$, son épaisseur $w(t)$, la masse de liens brûlés $M(t)$, et le taux de consommation des liens au sein du réseau $m(t) = -dM/dt$. On note par ailleurs $N_a(t)$ le nombre d'éléments actifs (i.e. en train de brûler) à un instant donné. Cette grandeur est le nombre de flammes présentes sur le réseau (ponctuelles, à l'échelle de ce dernier). Elle correspond au nombre de sites actifs dans le modèle MVC, et au

[30] La prise en compte d'un effet tunnel pourrait correspondre à des interactions de second plus proche voisin, c'est-à-dire à la possibilité, suivant une probabilité donnée, d'allumer un lien sans contact direct avec le lien en train de brûler, mais relié à un site voisin de ceux que le lien en cours relie.



(a) (b)

Figure 8.3 – Courbes $U - L$ correspondant aux modèles envisagés. (a) MVC (b) MVV. D'autres courbes peuvent être considérées, passant par exemple continûment de (0,0) à ($+\infty$,1).

nombre de liens actifs dans le modèle MVV. Le nombre de ces éléments actifs qui appartiennent au front est noté $N_{af}(t)$.

8.2.3 Aspects numériques

On développe ici quelques remarques et informations concernant le code qui a été conçu pour simuler la propagation de flammes en milieu désordonné d'après le modèle présenté précédamment.

Le programme est écrit en langage C. La génération des nombres aléatoires, le choix des liens passants au sein du réseau et la méthode d'indexation des sites s'appuie sur un programme de percolation de site (sur réseau carré de mailles carrées) mis en libre accès par Newmann et Ziff [33]. Ce dernier réalise uniquement une indexation des sites du réseau de façon à en déterminer les amas[31] [20].

Ce code a donc d'abord été adapté au cas de la percolation de lien. Ensuite, des modifications importantes ont été introduites, afin de prendre en charge l'aspect dynamique de l'étude à laquelle on s'intéresse ici : au lieu des amas de

[31] La connaissance des amas ne présente plus d'intérêt particulier pour les modèles étudiés dans ce mémoire, l'amas brûlable étant révélé une fois la flamme stoppée d'elle-même

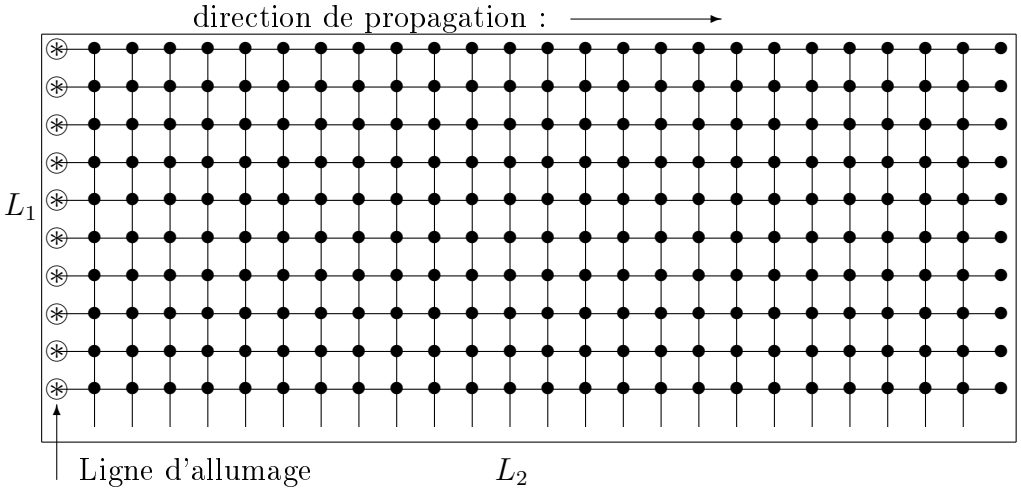


Figure 8.4 – Représentation schématique et grandeurs caractéristiques du réseau sur lequel on appuie le modèle de percolation étudié. Les sites n'ont pas été représentés sur la ligne inférieure afin de souligner le fait que, par périodicité du domaine, ce sont exactement ceux de la ligne supérieure de la grille.

liens au sein du milieu, c'est à l'ensemble des liens envahis par la flamme à un instant t que l'on s'intéresse : sa taille (ou masse), sa forme, sa vitesse d'évolution, ou encore l'épaisseur du front d'invasion ainsi mis en jeu. Un deuxième effort conséquent s'est révélé nécessaire pour le passage du modèle à vitesse constante (MVC) au modèle à vitesse variable (MVV). En effet, pour le modèle MVC – on l'a évoqué précédemment – chaque progression en temps conduit les flammes (ponctuelles) à passer d'un site à un autre (ou à s'éteindre). Dans le cas du modèle MVV, au contraire, le pas de temps en cours s'achève dès qu'un évènement devant modifier le calcul se produit, à savoir : chaque fois qu'un lien est entièrement brûlé. Il n'y a alors aucune raison pour que les autres liens parcourus par une flamme soient à ce même instant t_{ev} brûlés en totalité. La progression de la flamme ne peut plus être gérée simplement par pas de temps successifs. Elle doit se faire par évènements, et donc à intervalles de temps irréguliers.

Le suivi de la propagation de la flamme initiée sur le bord nécessite de maintenir à jour un tableau, déclaré sous le nom ACTIVS, des lieux des flammes

au sein du réseau. Pour le modèle MVC, il suffit d'y inscrire l'indice des sites actifs au pas de temps courant. Dans le cas du modèle MVV, l'information à conserver est cette fois multiple : liens où sont situées les flammes, position au sein du lien, sens de parcours, vitesse de parcours et temps restant avant que le lien en question soit entièrement consommé.

Un élément complique tout ceci : il s'agit de l'existence de "collisions", c'est-à-dire de liens qui sont consommés par leurs deux extrémités à la fois, auquel cas la vitesse effective de flamme que permet le lien double et devient égale à $2u_b$. Un lien b peut donc être caractérisé par trois temps : l'instant t_b^{ig} auquel il commence à brûler, l'éventuel instant $t_b^{coll} \geq t_b^{ig}$ auquel une deuxième flamme peut se présenter à l'extrémité encore inflammable du lien, et l'instant t_b^{ext} auquel le lien est entièrement consommé. La loi de régression du lien en train de brûler s'écrit alors :

$$L_b(t_b^{ig} \leq t \leq t_b^{coll}) = L^0 - u_b(t - t_b^{ig}) \tag{8.7}$$

$$L_b(t_b^{coll} \leq t \leq t_b^{ext}) = L^{coll} - 2u_b(t - t_b^{coll}) \tag{8.8}$$

Un tableau BONDPROPS contient, à l'indice b d'un lien, d'une part la vitesse u_b (effective, donc pouvant varier lors d'une collision), et d'autre part le temps de vie τ_b restant au lien. Lorsqu'un lien devient actif, la valeur de τ_b nécessite d'être actualisée à chaque tour de la boucle principale du code (laquelle correspond au passage d'un évènement au suivant).

On implémente le modèle MVV en considérant un tableau ACTIVS qui, afin que soient triés les liens actifs par ordre d'apparition des évènements qu'ils vont susciter, représente une liste chaînée. Le tableau contient alors trois lignes et un nombre suffisant de colonnes pour accueillir les liens actifs. Chaque colonne correspond à un lien actif. La première ligne en contient l'index b du lien dans le réseau, la seconde l'index (au sein du tableau) du lien le précédant (en terme d'instant d'apparition d'évènement associé à la combustion totale du lien), la dernière contient l'index (toujours au sein du tableau) du lien devant faire l'évènement suivant. Ainsi chaque lien pointe vers celui qui le précède et celui qui le succède. En première colonne, on stocke un indice pointant vers le premier des liens à traiter, ainsi que la position (au sein du tableau) du dernier lien.

Lorsqu'un évènement se produit et s'il ne s'agit pas d'une collision, la flamme faisant l'évènement arrive au niveau d'un site et peut donc se transemettre à de nouveaux liens, qu'il est alors nécessaire d'insérer dans la chaîne des éléments du tableau ACTIVS. La complication qu'introduisent les collisions vient du fait que l'apparition d'une collision implique en plus de telles insertions, la réinsertion (le déplacement) d'éléments du tableau en son sein. Plus précisément, ce qui complique ce traitement est la nécessité de minimiser, pour des questions de temps de calcul, les parcours du tableau ACTIVS au sein de la boucle principale du code . On peut se limiter à un parcours unique, mais cela implique d'effectuer à la fois : la mise à jour du temps de vie des liens, l'insertion des nouveaux liens devenus actifs à partir de l'évènement précédent, et le déplacement[32] des liens qui étaient déjà dans le tableau mais qui pour cause de collision voient leur durée de vie restante divisée soudainement par deux.

Ainsi, la progression de la flamme est assurée par une boucle qui consiste à : i/ déterminer le lien qui va "faire" l'évènement (parmi les candidats que sont : le premier lien du tableau ACTIVS et les liens (au maximum trois) à insérer ou déplacer lors du parcours du tableau) à traiter dans ce tour de boucle ; ii/ si ce lien avait une durée de vie τ_{bev} : réduire de cette valeur la durée de vie des liens restants au sein du tableau ACTIVS ; iii/ si cet évènement n'est pas une collision : déterminer le site auquel la flamme arrive d'après le sens de propagation local de la flamme ; iv/ déterminer quels sont les liens accessibles depuis ce site et selon l'état de ces liens : traiter l'apparition d'une collision (si le lien appartient déjà au front) ou insérer l'indice du lien dans la liste des nouvelles insertions à effectuer au sein du tableau ACTIVS. Quelques détails complémentaires concernant le code du modèle MVV sont fournis en Annexe C.

Une dernière remarque peut être faite : dans le cadre du modèle MVV il y a autant d'évènements que de liens appartenant à l'amas accessible à la flamme. Ce dernier "grossit" rapidement lorsque p s'éloigne du seuil par valeur supérieure et vaut M à la limite $p = 1$. Lorsqu'on s'approche de $p = 1$, il est

[32] L'insertion (conditionnée par un ordre) d'éléments dans un tableau doublement "mouvant" est cruelle !

nécessaire d'avoir un rapport $L_2/L_1 \simeq 50$, ce qui implique déjà pour $L_1 = 100$ une valeur $M \simeq 10^6$. À cela s'ajoute un facteur $K \sim 10^3$ qui est le nombre de réalisations du calcul menées pour effectuer les moyennes. Un tel calcul implique donc environ 10^9 parcours du front.

Les calculs ont été effectués pour $K = 5000$ réalisations. L'ensemble des réalisations fournit un résultat pour une valeur du couple (L_1,p) et un modèle donné.

8.3 Premières remarques et observations qualitatives

Avant de présenter les résultats obtenus par simulation Monte Carlo pour les grandeurs moyennes, un certain nombre d'observations peuvent être faites à partir des résultats *non moyennés*, donc basées sur des réalisations uniques et les "clichés" correspondants ("photographies" de l'évolution du front sur le réseau à des instants donnés).

Ces remarques sont notamment présentées de façon à répondre aux questions : quelle définition adopter pour le front ? À quelle vitesse s'intéresser plus particulièrement ?

Un certain nombre de commentaires sont communs aux deux modèles précédemment évoqués. Le modèle sur lequel s'appuie le propos n'est donc précisé que si cela est nécessaire.

8.3.1 Régime sous-critique : $p < p_c$

Sous le seuil de percolation, par définition même, il ne devrait pas exister d'amas percolant. Les effets de taille finie sont cependant responsables d'une probabilité non nulle d'apparition d'un tel amas, probablilité très faible dès qu'on s'éloigne "suffisamment" du seuil. On l'a illustré au chapitre précédent.

La flamme initiée sur le bord du réseau est géométriquement restreinte à ne pouvoir brûler que l'amas des liens "en communication" avec ce bord, amas (très probablement) non percolant (Fig. 8.6). Sa vitesse moyenne (que l'on définit de manière précise ultérieurement) est donc nulle aux temps longs. Les

propriétés dynamiques ne présentent plus d'intérêt (excepté le temps de vie de la flamme).

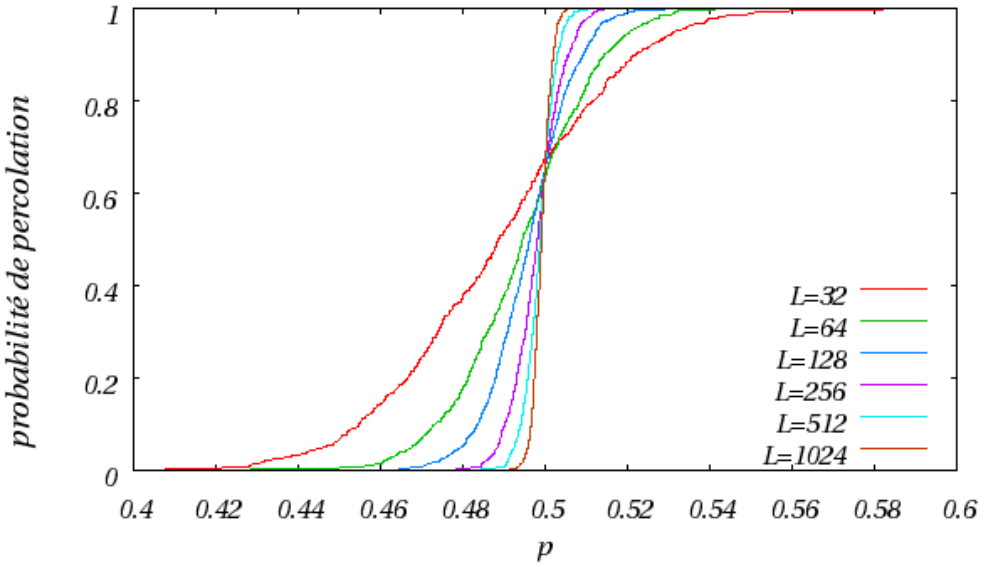


Figure 8.5 – Probabilité de percolation suivant $L_1 = L_2 = L$.

On délaisse par la suite ce régime, pour ne considérer que $p \geq p_c$.

8.3.2 Au voisinage du seuil

Lorsqu'on se situe au voisinage du seuil (i.e. pour $|p - p_c| \ll 1$), la percolation se manifeste en tant que phénomène critique : une partie des réalisations nécessaires aux calculs statistiques présente un amas percolant, tandis que les autres ne percolent pas.

Une moyenne calculée à partir de données correspondant à deux comportements différents est-elle signifiante ? Pour une grandeur telle que la vitesse moyenne U de la flamme sur le réseau, la réponse est non. Il serait plus intéressant de définir un certain $\tilde{U}$ comme la valeur de U moyennée en se restreignant aux grilles qui percolent ($\tilde{U} = (\sum_r U_r)/K_p$, alors que $U = (\sum_r U_r)/K$ si K_p grilles percolent sur les K réalisations envisagées pour le calcul, U_r désignant la vitesse obtenue lors de la $r^{\text{ième}}$ réalisation).

Dans cette mesure, les moyennes calculées très près du seuil, lorsque la probabilité de percolation est par exemple d'environ 1/2, ne semblent pas avoir



Figure 8.6 – Amas brûlable pour diverses valeurs de $p < p_c$ et $L_1 = L_2 = 50$. Lorsqu'on s'éloigne de p_c par valeur inférieure, la flamme est très vite restreinte à une région extrêmement réduite.

d'interprétation physique intéressante[33]. Elles sont par ailleurs très fluctuantes au cours du temps : au seuil de percolation, le désordre (géométrique) est à son maximum. Les deux comportements du milieu (favorable/défavorable au passage d'une flamme) sont presque en "équilibre", et l'un peine à dominer sur l'autre. Ceci est à relier à nature fractale que présente la structure du réseau, pour des échelles de longueur inférieures à la longueur de corrélation du milieu (laquelle correspond à la taille des plus gros trous présents). Au seuil, cette longueur devient aussi grande que possible – donc limitée par L_1 – et l'on trouve alors des trous de tailles selon toutes les échelles de longueur accessibles (Fig. 8.7), ce qui induit les variations importantes observées pour les grandeurs calculées.

Par la suite, le terme voisinage du seuil désignera uniquement la région proche du seuil mais suffisamment éloignée pour que la probabilité de percolation y soit proche de 1.

8.3.3 Cas particulier où $p = 1$

On considère le modèle MVC à $p = 1$. Tous les liens du réseau sont viables et parcourus à la même vitesse $u_b = 1$. Au cours d'un pas de temps, la flamme

[33] Une grande part de l'universalité des modèles de percolation s'exprime pourtant dans les exposants décrivant justement le comportement au voisinage du seuil.

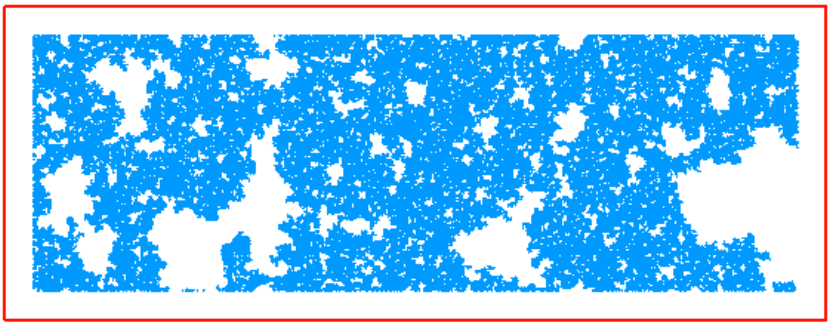


Figure 8.7 – Au voisinage du seuil ($p = 0.506$ ici), on trouve des trous sur toutes les échelles de longueur jusqu'à celle de la grille ($L_1 = 300$, $L_2 = 900$).

parcourt exactement la longueur des liens. Dans ce cas, les régions actives se trouvent exactement localisées au niveau des sites d'une même ligne, et forment un front, plan, sans aucune ambiguïté de définition. À chaque pas de temps, ce front passe d'une rangée de sites à la rangée suivante, restant plan et se propageant à vitesse constante $U = u_b = 1$. Il consomme de ce fait $2L_1$ liens (L_1 liens horizontaux et autant de verticaux) de telle sorte que U est proportionnelle à $m/2$.

Lorsque $p \to 1$ sans être égal à 1, on se trouve à la limite du désordre faible. Dans ce cas, il n'est pas exclu que le front obtenu puisse être décrit par une équation de type KPZ [28], éventualité qui n'a pu être interrogée plus avant ici, faute de temps.

Dans le cas du modèle MVV il en va différemment, puisque le front se déforme dès le premier pas de temps, même si tous les liens sont présents.

8.3.4 Obstacles s'opposant à l'avancée du front lorsque $p < 1$

Les obstacles s'opposant à l'avancée du front correspondent aux trous laissés par les liens manquants. Dans le cadre du modèle MVV, l'arrivée du front sur un lien à basse vitesse correspond d'une certaine manière à un obstacle, n'empêchant pas le front d'avancer mais le ralentissant localement, conduisant par là à sa déformation.

Le front rencontre également des poches imbrûlables, sortes d'îlots délimités par des liens tous manquants pour l'atteindre. D'autres poches se présentent également comme des obstacles temporaires : il s'agit de régions accessibles par un lien unique. Tant que la flamme n'a pas atteint ce lien, la poche ainsi délimitée est semblable du point de vue du front à un trou.

On peut remarquer de plus qu'un retard du front n'est jamais compensable, du moins dans le cadre du modèle à vitesse constante. Si l'on considère le réseau complet auquel on retire un unique lien, le défaut que cela entraine sur le front sera toujours conservé par la suite.

La notion de front, face aux obstacles évoqués, est toute relative. Le terme de front laisse penser à une ligne continue d'éléments actifs : ceci n'est en fait le cas que pour des valeurs suffisamment élevées de p.

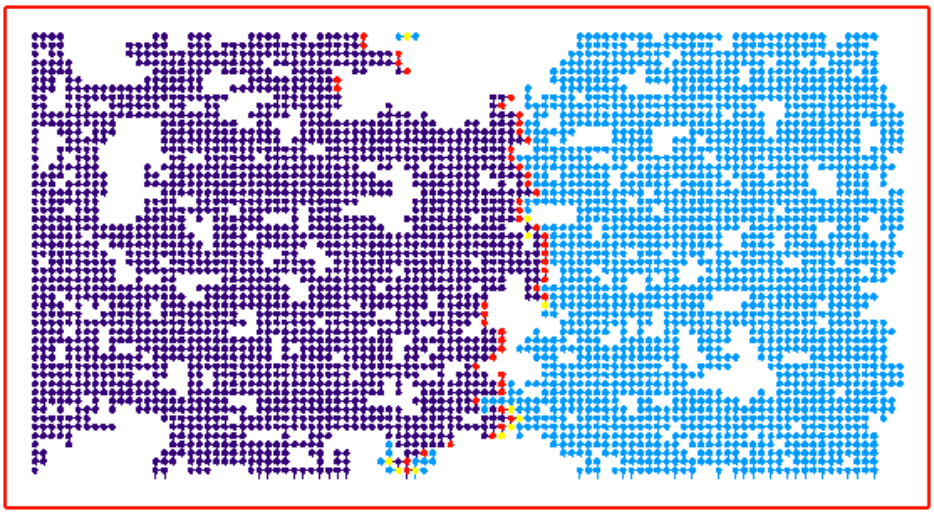


Figure 8.8 – Discontinuité du front (en rouge), sous l'effet des trous présents au sein du milieu. $L_1 = 50$, $p = 0.51$, modèle MVC.

8.3.5 Direction de propagation et corrélations transversales

Si globalement la flamme présente une direction de propagation privilégiée, les éléments actifs peuvent également avoir une propagation transversale, ou

même à rebours. Ceci est manifeste[34] à proximité du seuil. À la limite $p \to 1$, au contraire, le front avançant de manière presque plane, ses éléments actifs ne rencontrent que peu du milieu frais ailleurs que devant lui.

Le phénomène de saturation de l'épaisseur du front est à imputer à cette propagation perpendiculairement à la direction principale. Il en résulte des corrélations transversales, grâce auxquelles le front ressent l'effet de taille finie du réseau [3]. On peut imaginer clairement ce lien entre correlations transversales et saturation de l'épaisseur du front si l'on considère, pour $p = 1$ et le modèle MVC, l'allumage d'un site unique au milieu du bord d'allumage habituel. À chaque pas de temps, le front progresse d'un lien vers l'avant et s'étale transversalement. L'épaisseur du front croît alors à chaque pas de temps, jusqu'à ce que le front rencontre les bords. Il atteint alors une forme stationnaire et triangulaire, qui progresse en bloc à vitesse 1.

8.3.6 Choix des définitions du front et de la vitesse moyenne

Comme les observations précédentes peuvent l'illustrer, les notions de front et de vitesse du front n'ont pas de définition immédiate. On donne ici quelques arguments expliquant la définition choisie, en s'appuyant sur le cas du modèle MVC.

La propagation de la flamme est la conséquence du mouvement des sites actifs qui progressent au sein du réseau. Chaque site actif consomme des liens, et le taux de consommation m, en terme de masse, est directement lié au nombre de ces points et s'écrit :

$$m = \sum_{s=1}^{N_a} u_b \equiv N_a$$

si la densité des liens est la même pour tous. Ce taux de consommation définit une première vitesse. On a vu qu'à $p = 1$ ce taux est proportionnel à la vitesse de propagation du front (alors définie sans ambiguïté). Pour $p < 1$ tous les points actifs ne contribuent pas à la propagation en terme d'invasion. Par exemple, lorsque deux sites actifs sont situés sur une même ligne, seul celui qui

[34] Les propagations à rebours sont favorisées lorsqu'on ne considère pas des conditions aux limites périodiques.

est le plus avancé peut être perçu comme "envahisseur"[35]. Si l'on s'intéresse au front en terme d'invasion, c'est-à-dire au front précurseur, il semble cohérent de ne choisir les candidats au front que parmi les sites "non frais" les plus avancés sur chaque ligne. Une idée envisageable est de considérer uniquement les sites à la fois actifs et les plus avancés. On se heurte alors au fait qu'un tel front n'existe pas toujours : il arrive que tous les sites actifs soient moins avancés que des sites déjà brûlés, sans d'ailleurs que cela implique l'arrêt définitif du front !

Les sites brûlés qui se trouvent en première ligne n'apportent rien à la progression du front en terme de vitesse, mais sont porteurs d'information en terme de position.

La définition du front finalement adoptée pour le modèle MVC est alors la suivante : le front est constitué des L_1 sites (un par ligne) les plus avancés dans le milieu, en considérant aussi bien des sites actifs que brûlés. Cette définition conduit à un front toujours défini et de vitesse $U \geq 0$, définie comme la dérivée de la position $b(t)$ (suivant la direction de propagation) de son barycentre. Si la position de l'élément du front appartenant à la $i^{\text{ème}}$ ligne au $n^{\text{ième}}$ pas de temps est notée $h(i,n)$, on a alors :

$$b(t) = \frac{\sum_{i=1}^{L_1} h(i,t)}{L_1} \tag{8.9}$$

$$U(t) = \frac{d\,b(t)}{d\,t} \tag{8.10}$$

Ces définitions se généralisent immédiatement au cas à vitesses variables (MVV).

8.4 Résultats des simulations Monte Carlo

Cette section présente les résultats que l'on a obtenu par méthode de Monte Carlo, établis à partir de $K = 5000$ réalisations pour chaque moyenne. On commence par évoquer la forme du front en elle même, puis les variations des

[35] La notion d'envahisseur est une notion toute relative dans le temps, car le site actif du dessus peut s'éteindre ou "s'égarer", et l'autre trouver un chemin qui l'amène ensuite à devenir l'envahisseur. Potentiellement, aucun point actif n'est plus envahisseur que l'autre.

grandeurs dynamiques. Les comportements à proximité du seuil et dans la limite du désordre faible font chacun l'objet d'une sous-section.

8.4.1 Caractérisation de la forme du front

On s'intéresse ici à la forme $h(i,n) = h(x_i, t_n)$ du front. L'évolution de ce profil, en fonction du temps et pour une valeur donnée de p, a été tracée pour chacun des deux modèles et apparaît sur les figures 8.18 à 8.22. On remarque que la différence d'aspect des profils d'un modèle à l'autre n'est pas particulièrement marquée, ce qui est confirmé par la suite de l'étude. Les profils sont tracés à partir de la même grille, et la même unité de temps. On constate par contre la différence nette d'avancée du front, ce qui est normal dans la mesure où la flamme se propage le long des liens à vitesse 1 pour le modèle MVC et à vitesse toujours moindre pour le modèle MVV[36].

Les grandeurs permettant de caractériser le front sont principalement son épaisseur w (l'écart quadratique moyen de la forme h du front à la valeur moyenne $\bar{h}$) et ses propriétés de corrélation. L'étude n'a pu ici s'étendre à ces dernières, qui présentent cependant un intérêt certain. La longueur de corrélation transversale du front $\xi^{//}$, pour ne citer qu'elle, aurait pu permettre d'appuyer certaines conclusions en terme de caractérisation de la croissance du front.

L'évolution de l'épaisseur w du front avec t est d'aspect similaire à celle rencontrée pour nombre de modèles de croissance d'interfaces [3]. Il existe un temps t_w séparant deux comportements distincts : pour $t \ll t_w$ l'épaisseur du front croît avec t, tandis que pour $t \gg t_w$ elle a atteint une valeur de saturation, fluctuant alors faiblement autour de cette valeur.

Au cours de la première phase, la dynamique du front est relativement complexe, notamment pour le modèle MVC. Une valeur unique β ne suffit pas à caractériser la phase de croissance, qui est généralement caractérisée par une loi $w \sim t^{\beta}$. L'exposant mis en ainsi en évidence s'appelle l'exposant de croissance (*growth exponent*). La figure 8.9 montre que plusieurs phases de croissance

[36] Il aurait peut-être été plus intéressant d'établir une comparaison à partir de distributions de liens conduisant à la même vitesse moyenne.

existent dans notre cas, caractérisées par des exposants différents. La valeur et le nombre de ces exposants, de même que les instants délimitant les phases auxquels ils correspondent, varient avec p (Fig 8.10). Plus précisément et en partant de $p \simeq p_c$ – où une phase unique semble présente – on voit apparaître et s'étendre une seconde phase qui prend de l'ampleur au détriment à la fois de la phase saturée et de la première phase de croissance. Lorsque $p \to 1$, la première phase est réduite aux tous premiers instants de croissance du front. Les évolutions des exposants β_1 et β_2 apparaissants le plus manifestement sur la figure 8.9 sont reportées figure 8.11. Deux temps $\tau_{1,2}$ et $\tau_{2,sat}$ sont ainsi définis : le premier marque le passage de la première phase à la seconde, tandis que l'autre marque le basculement de la seconde phase au régime saturé. Leur évolution avec p est reportée figure 8.12.

On note que pour le modèle MVV, les phases de croissance en loi puissance sont moins manifestes et plus réduites. Leur description ne semble pas apporter d'information intéressante : elles ne sont pas plus évoquées ici.

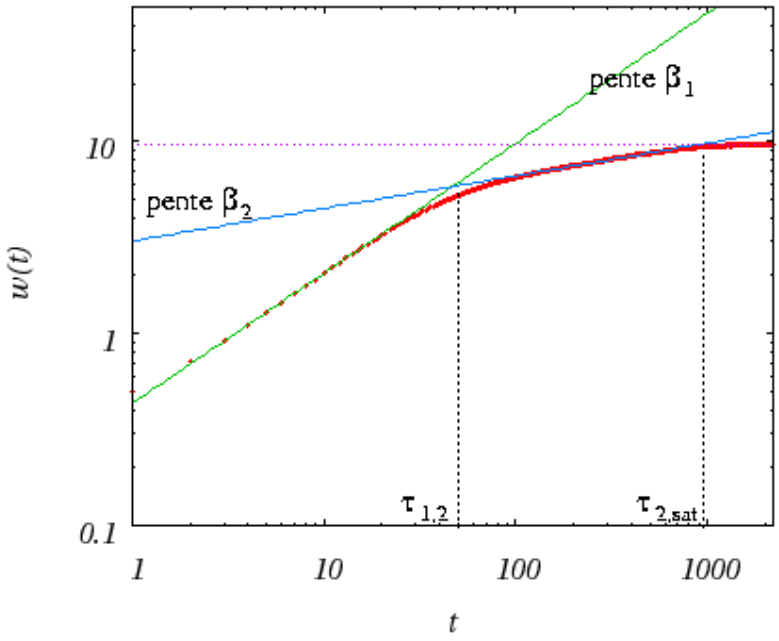


Figure 8.9 – Régime de croissance de w. Modèle MVC et $p = 0.55$. On constate l'existence de deux phases d'exposants différents lors de l'épaississement du front.

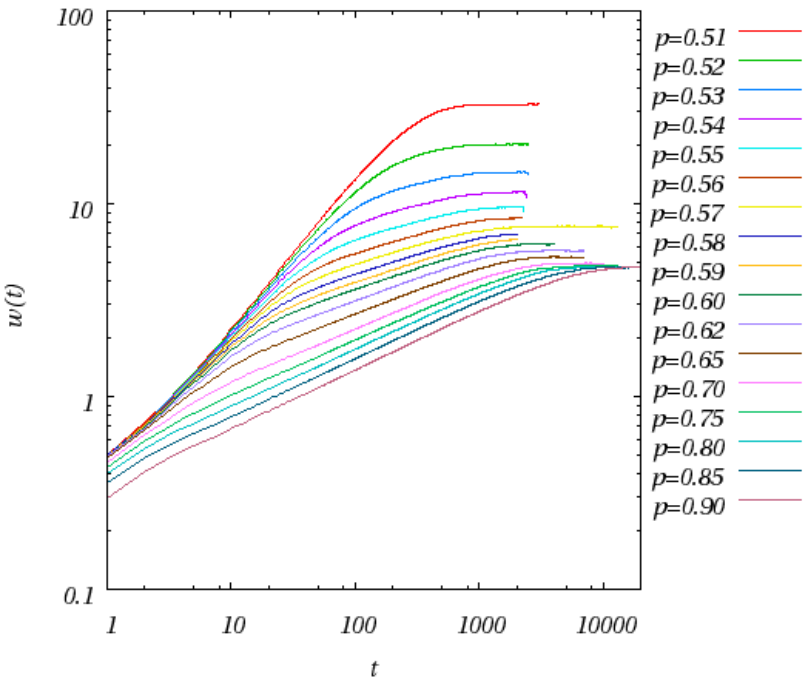


Figure 8.10 – Régimes de croissance de w selon p. Modèle MVC, $L = 300$. On peut voir une phase apparaître lorsque p augmente, et empiéter sur les autres phases.

On s'intéresse plus particulièrement à la valeur de l'épaisseur saturée, w_{sat}, ainsi qu'à l'évolution de t_w. Ce dernier est défini ici comme le temps auquel l'épaisseur w atteint 95% de sa valeur saturée, tandis que $\tau_{2,sat}$ évoqué précédemment était évalué à l'intersection des droites caractérisant le régime saturé et la seconde phase de croissance en diagramme $\log - \log$. La sensibilité de cette valeur à la pente (obtenue par moindres carrés) la rend moins attractive que t_w, que l'on considère à partir de maintenant.

On constate que l'épaisseur décroît rapidement avec la diminution du désordre (Fig. 8.13 et 8.14). On pourrait s'attendre à ce que w tende vers 0 lorsque $p \to 1$ dans le cadre du modèle MVC, puisque pour $p = 1$ on a exactement $w = 0$. Deux situations sont envisageables : soit le cas $p = 1$ ne s'inscrit pas comme la limite pour $p \to 1$ du comportement observé lorsqu'il existe un nombre non nul de liens coupés, auquel cas il semblerait que $w_{sat}(p \to 1)/\sqrt{L_1} \equiv cte. \simeq 0.27$; soit la limite est continue mais présente – d'après les calculs – une zone de

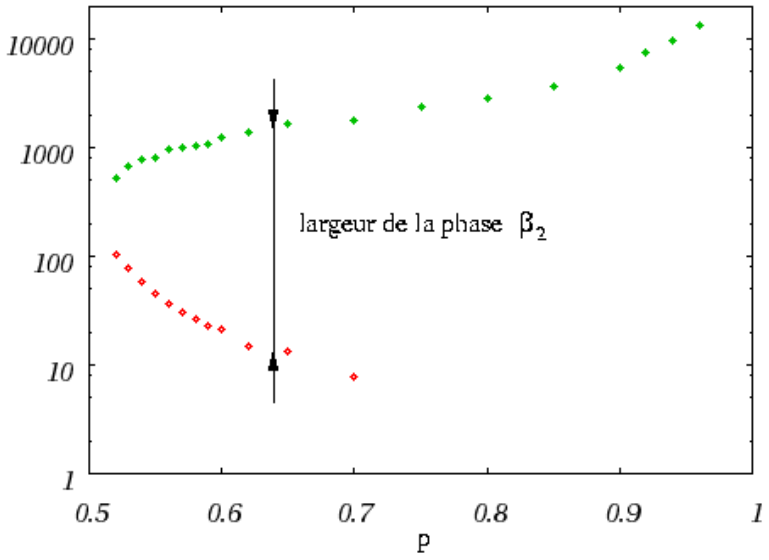


Figure 8.11 – Variations de $\tau_{1,2}$ (rouge) et $\tau_{2,sat}$ (vert) avec p. Modèle MVC, $L = 300$.

transition très mince entre les deux comportements.

Un raisonnement simple semble indiquer qu'on est en présence de cette dernière possibilité. On considère un réseau défini par L_1, L_2. Il comporte $M \sim 2L_1L_2$ liens, si bien qu'en prenant $p = 1 - 1/M$, un seul lien (exactement) est coupé. Dès que le front a dépassé ce lien, il atteint sa forme stationnaire qui présente un unique défaut ou est plane, selon l'orientation du lien manquant. En moyenne sur un grand nombre de réalisations, on aura alors :

$$w_{sat} = \frac{w^1_{sat}}{2} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{L_1 - 1}{L_1}} \tag{8.11}$$

puisque l'épaisseur w^1_{sat} du front lorsque un unique lien est manquant et horizontal – conduisant alors à un défaut du front – peut être calculée exactement. Ainsi, pour $L_1 \gg 1$ on a $w^1_{sat} \sim 1/\sqrt{L_1}$ et l'épaisseur peut être rendue aussi petite qu'on le souhaite, à condition de prendre un réseau suffisamment large et de s'approcher[37] suffisamment près de 1 pour observer cette valeur de w_{sat}.

[37] Pour observer la saturation lorsque $p \to 1$ et $L_1 = 100$ on est obligé de considérer $L_2 \simeq 100L_1$, si bien que $1/M \sim 10^{-6}$. Le calcul effectué nous dit que pour $p = 1 - 10^{-6}$ on peut alors observer $w^1_s at \simeq 0.1$. Cela laisse entendre combien la transition vers $w = 0$ est localisée à proximité de $p = 1$.

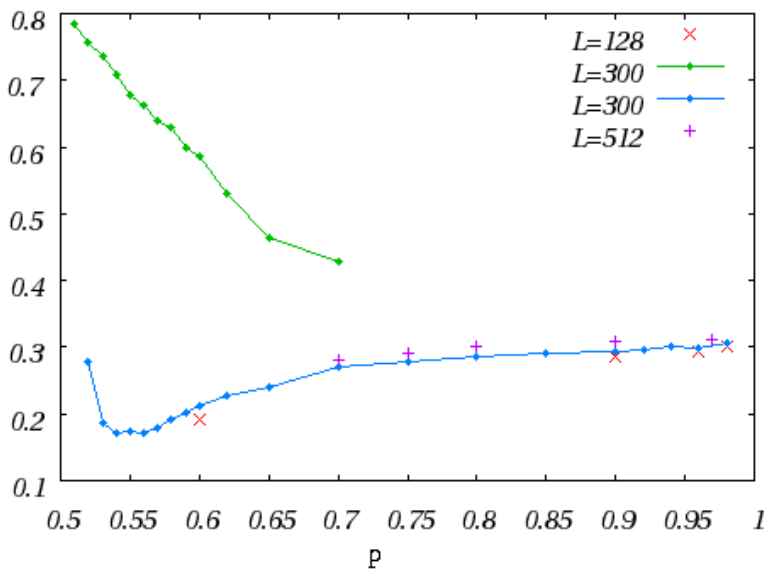


Figure 8.12 – Variations des exposants de croissance β_1 (courbe supérieure) et β_2 (courbe inférieure) avec p. Modèle MVC. ($\cdot$) $L = 300$; ($\times$) $L = 512$; ($+$) $L = 128$.

L'épaisseur saturée du front w_{sat} tend à diverger à l'approche du seuil $p_c = 1/2$, ce qu'elle ferait certainement pour un réseau d'extension infinie. Ceci est, une fois encore, à relier à la structure fractale du milieu au seuil : la longueur de corrélation (celle définie en percolation et non celle du front) tend à devenir infinie et le milieu présente des lacunarités de tous les diamètres, lesquels obligent le front à devenir très découpé et entrainent de cette façon la divergence de w_{sat}.

On note peu de différence entre les valeurs de w_{sat} pour les deux modèles.

Pour ce qui est de t_w (Fig. 8.15 à 8.17), on constate d'une part que le temps nécessaire pour atteindre la saturation devient très grand lorsque $p \to 1$. La comparaison des temps de saturation de w entre les deux modèles semble montrer une différence de comportement lorsque $p \to 1$: l'épaisseur du front pour le modèle MVC semble tendre vers une saturation de plus en plus lente. C'est pour cette raison qu'on ne fait ici que deviner cette tendance, et que des points n'apparaissent pas pour des $p > 0.95$ sur les courbes caractérisant le modèle MVC. On note que les variations de t_w ne sont pas monotones : il existe

une valeur de p, dépendante de L_1, pour laquelle t_w présente un minimum.

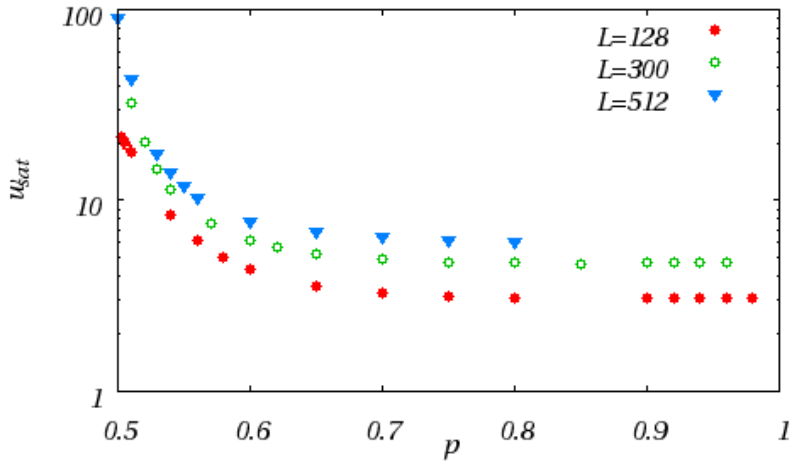


Figure 8.13 – Variations de w_{sat} avec p et L. Cas du modèle MVC.

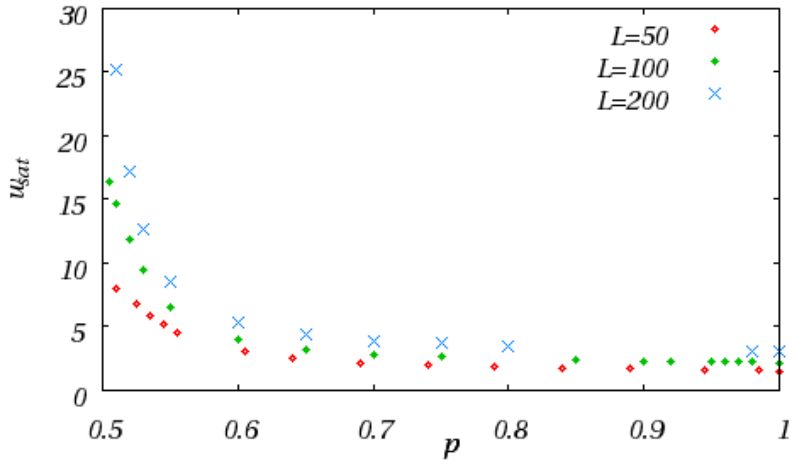


Figure 8.14 – Variations de w_{sat} avec p et L. Cas du modèle MVV.

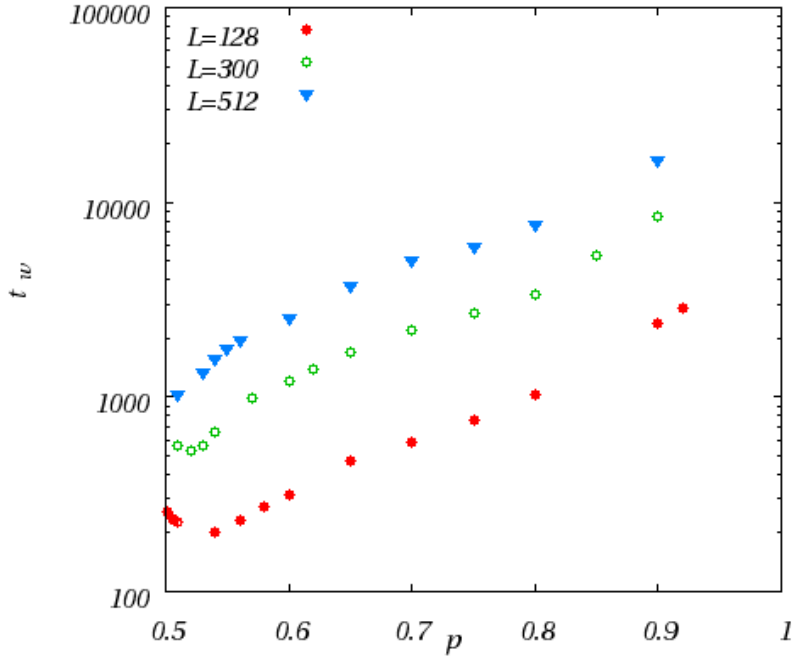


Figure 8.15 – Variations de t_w avec p et L. Cas du modèle MVC.

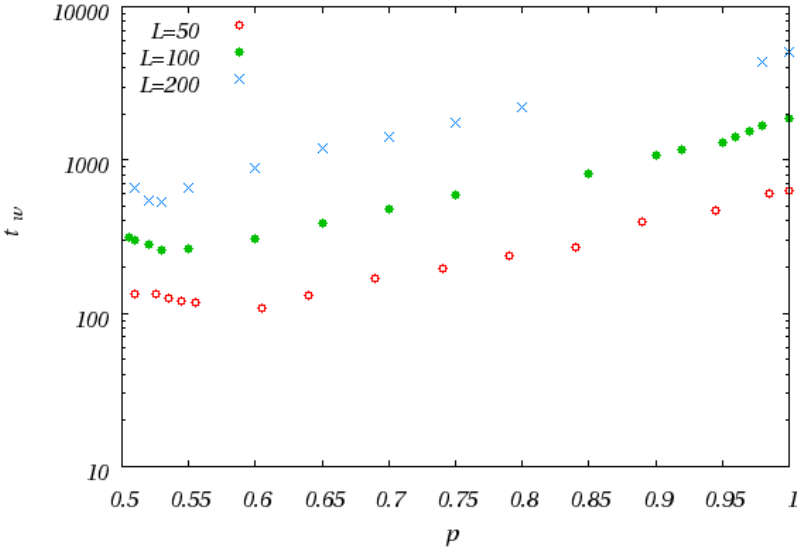


Figure 8.16 – Variations de t_w avec p et L. Cas du modèle MVV.

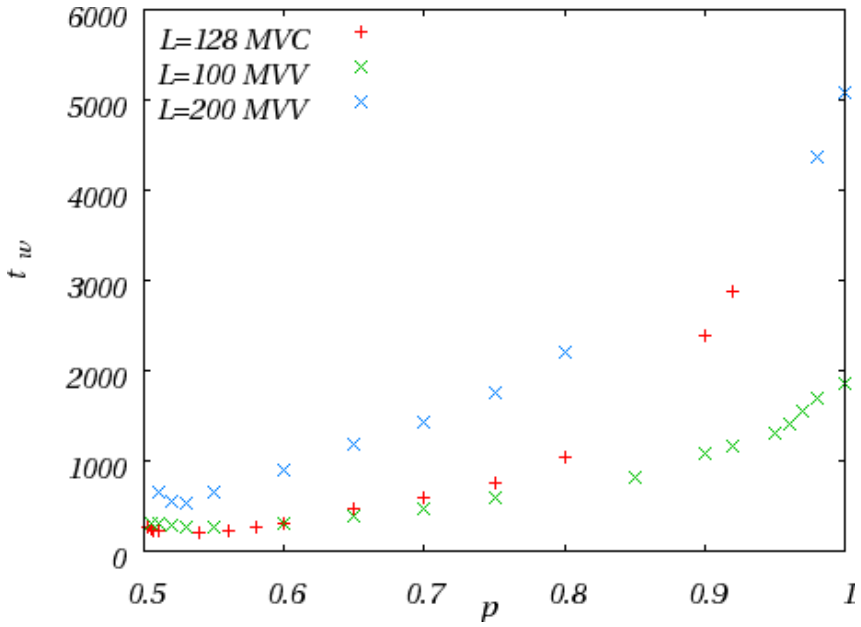


Figure 8.17 – Comparaison de l'évolution avec p de t_w pour les deux modèles étudiés.

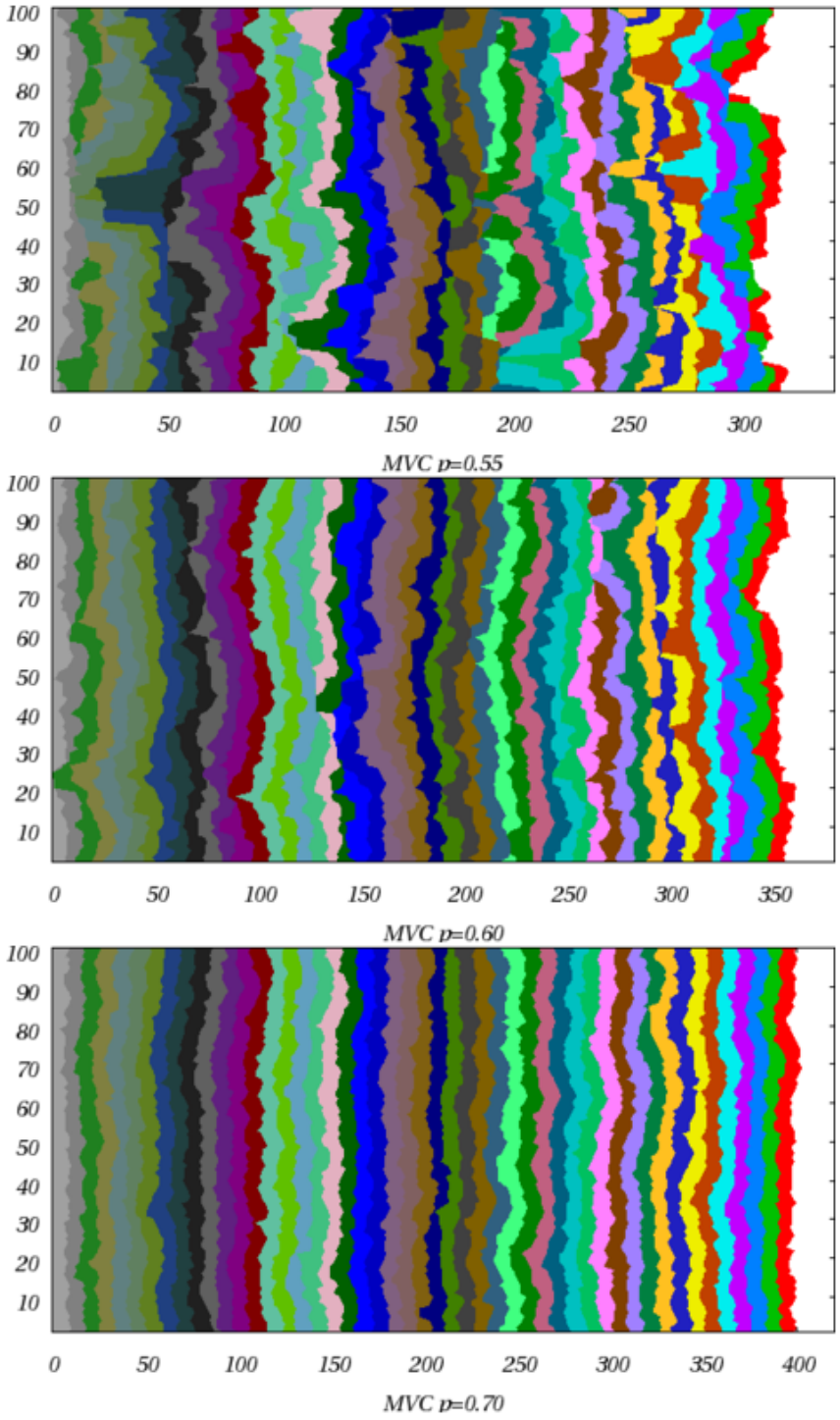


Figure 8.18 – Évolution du front du modèle MVC pour $p = 0.55, 0.60, 0.70$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$.

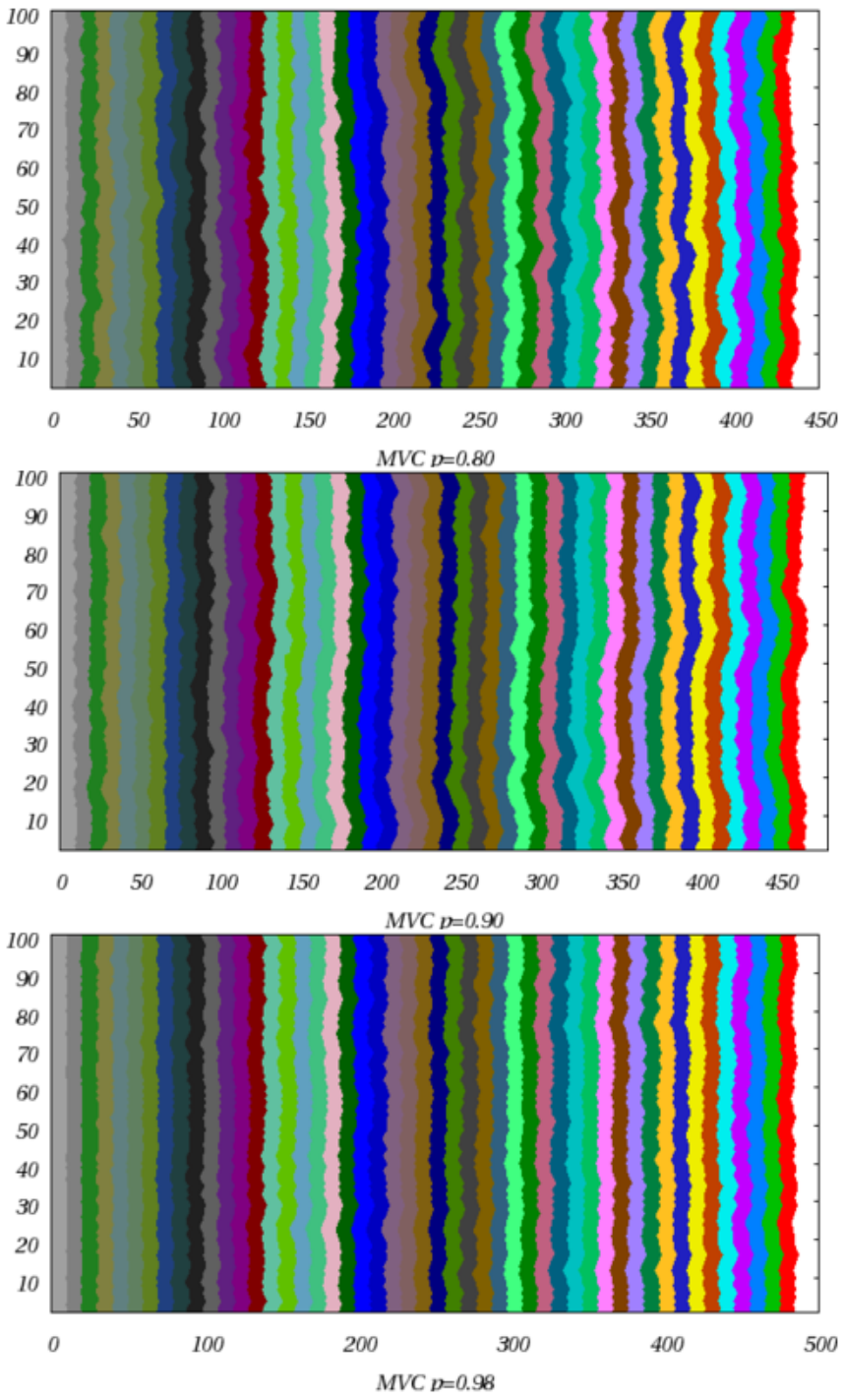


Figure 8.19 – Évolution du front du modèle MVC pour $p = 0.80, 0.90, 0.98$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$.

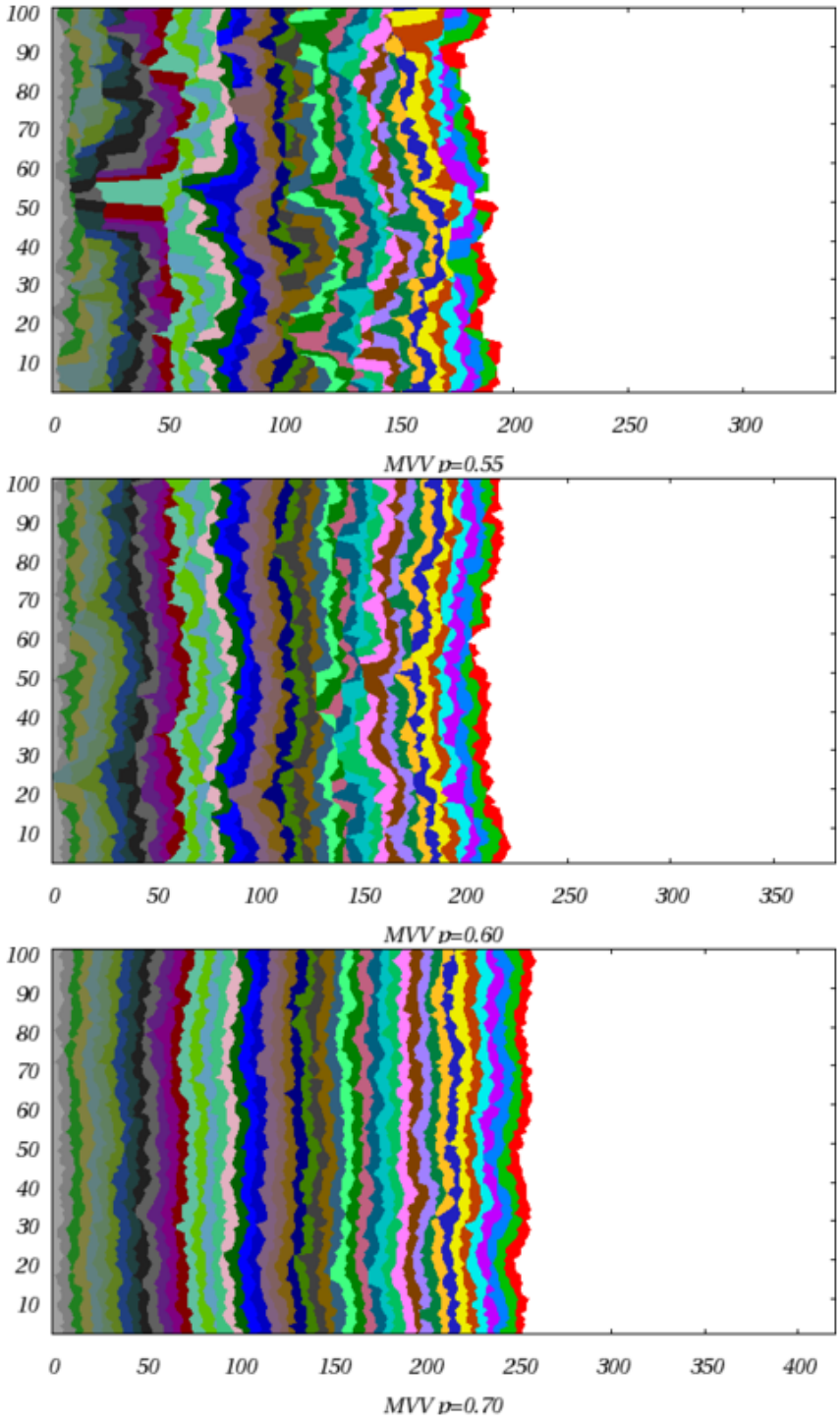


Figure 8.20 – Évolution du front du modèle MVV pour $p = 0.55, 0.60, 0.70$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$.

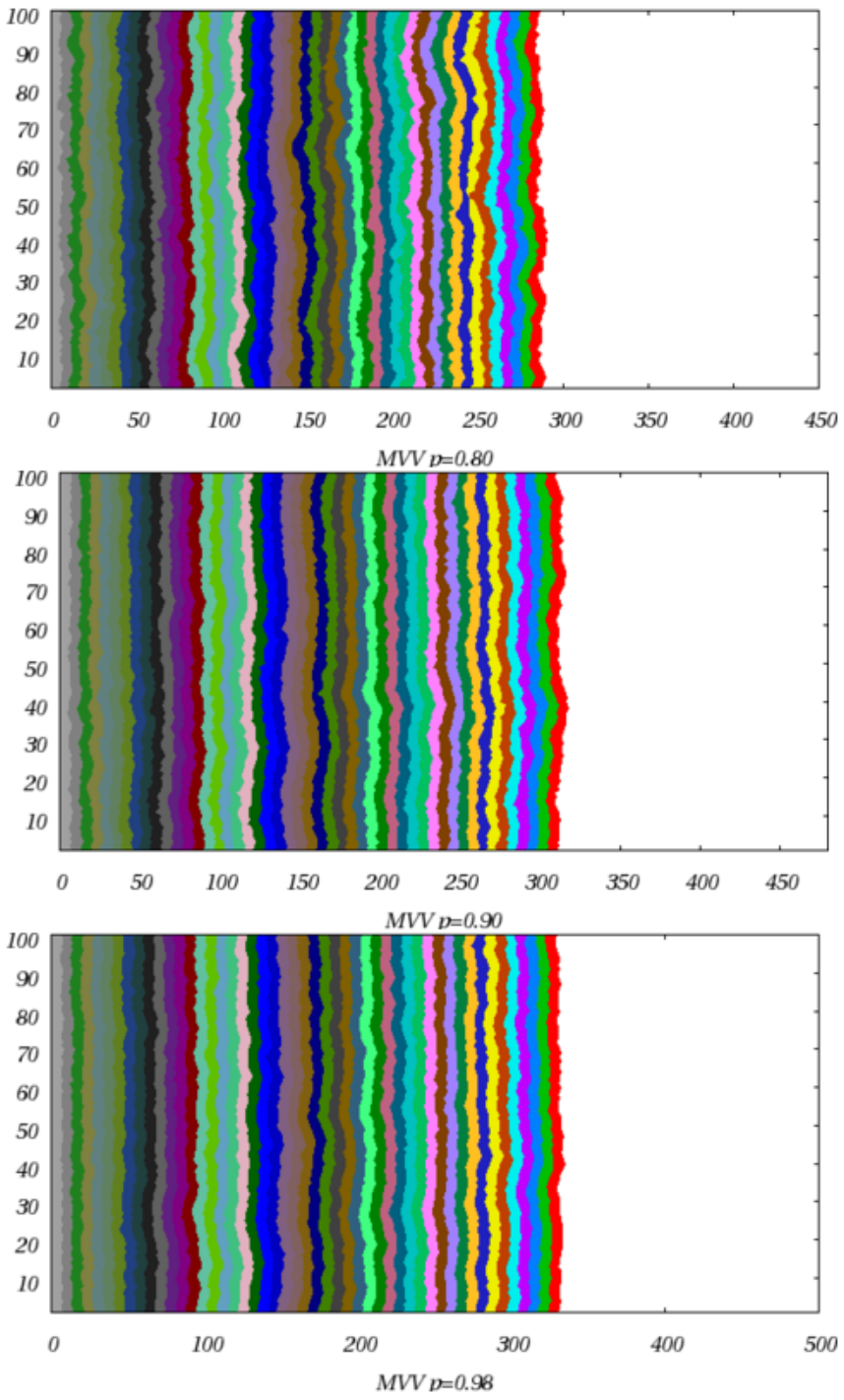


Figure 8.21 – Évolution du front du modèle MVV pour $p = 0.80, 0.90, 0.98$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$.

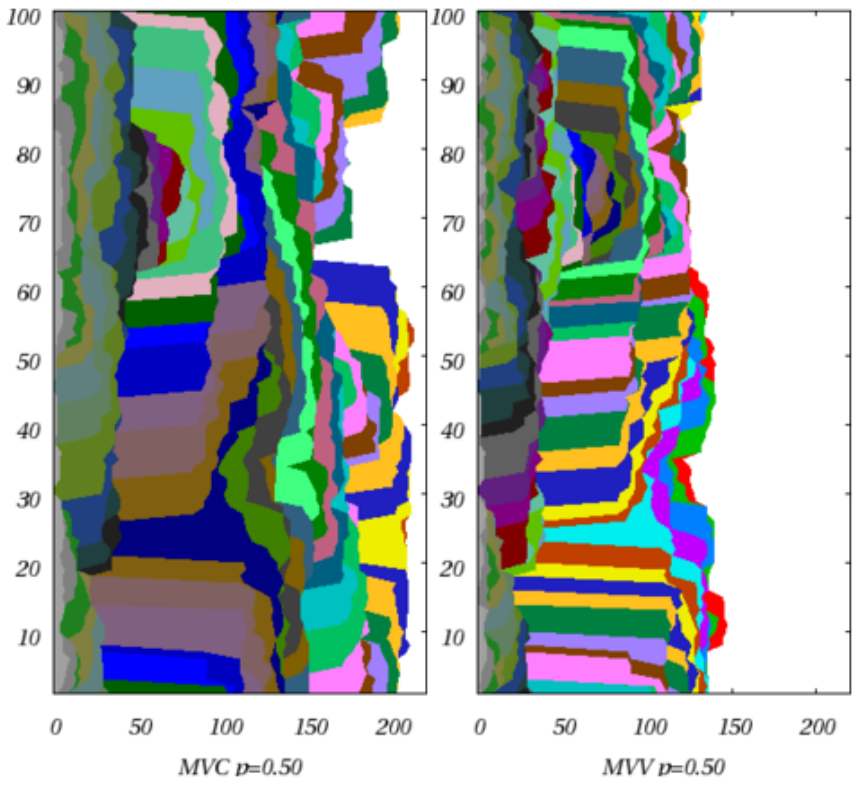


Figure 8.22 – Évolution des fronts issus des deux modèles pour $p = 0.50$. Sa couleur change tous les $\delta t = 10$.

8.4.2 Régime de saturation

Grandeurs à la saturation et temps d'établissement

Le phénomène de saturation qui apparaît pour l'épaisseur du front w existe également pour les autres grandeurs évoluant en temps : U, m, N_a, N_{af} saturent toutes.

Par contre, la saturation n'apparait pas au même instant pour ces grandeurs et pour w (Fig. 8.28 et 8.31).

Le régime transitoire à la suite duquel apparaît la saturation ne semble pas présenter de propriétés remarquables, comme c'est la cas pour w. On délaisse ces régimes pour ne s'intéresser qu'aux valeurs saturées.

Les courbes de vitesse $U_{sat}(p, L_1)$ sont reportées sur la figure 8.23 pour chacun des deux modèles. On constate qu'ils présentent un comportement semblable. Si l'on norme U_{sat} au moyen de sa valeur à $p = 1$, on trouve que les deux modèles présentent le même comportement, excepté un écart au voisinage du seuil (figure 8.24).

En outre, à l'échelle de la figure, des effets de tailles finies (i.e. dépendances avec L_1) ne sont pas visibles. On verra qu'il faut s'approcher très près du seuil pour les voir se manifester.

Les courbes $m_{sat}(p, L_1)$ et $N_{af,sat}(p, L_1)$ montrent quant à elles une dépendance à L_1 aussi visible qu'elle était prévisible (Fig. 8.25 à 8.27).

On constate que si le temps de saturation de l'épaisseur w du front devient de plus en plus grand lorsque p augmente, le temps d'atteinte d'un régime établi pour les autres grandeurs suit un comportement opposé. Ceci a une conséquence importante sur l'intérêt que présente l'étude des régimes saturés. Celui-ci serait en effet moindre s'il fallait – comme c'est le cas pour w – considérer des milieux tels que $L_2 \gg L_1$ afin de pouvoir les observer.

Finalement, c'est le fait que le temps de saturation pour U montre une dépendance avec L de plus en plus faible lorsque p augmente qui est notable.

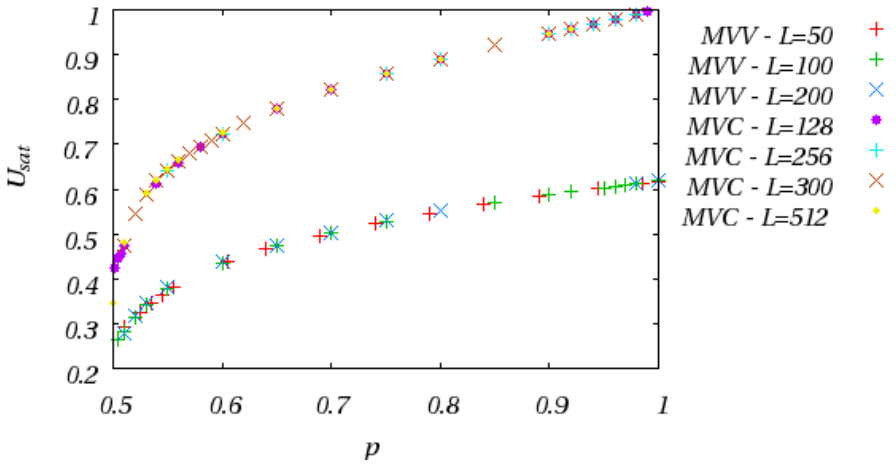


Figure 8.23 – Variations de U_{sat} suivant p.

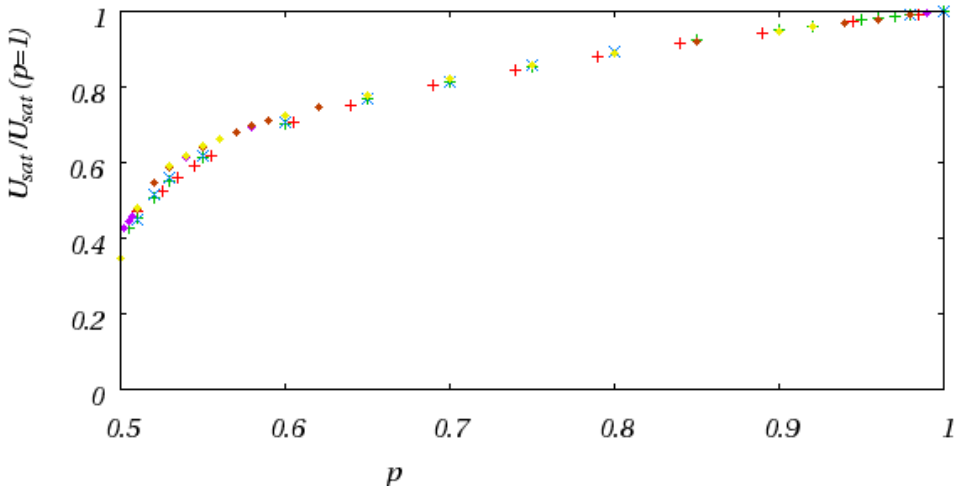


Figure 8.24 – Variations de U_{sat} suivant p. La courbe pour le modèle MVV a été normée par la valeur $U_{sat}(p = 1)$.

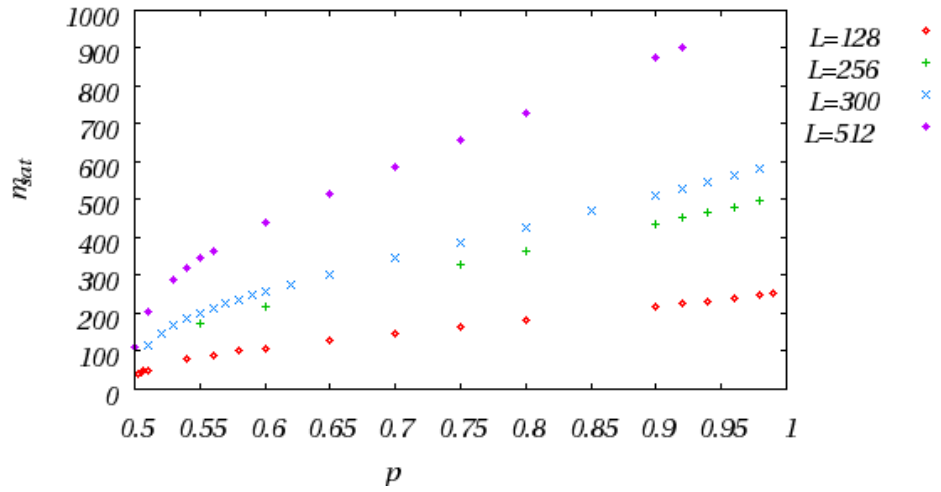


Figure 8.25 – Variations de m_{sat} suivant p. Modèle MVC.

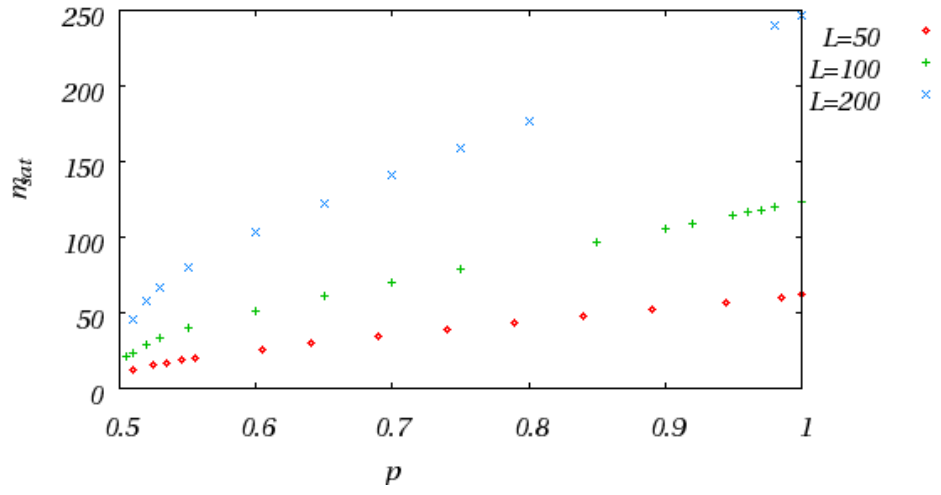


Figure 8.26 – Variations de m_{sat} suivant p. Modèle MVV.

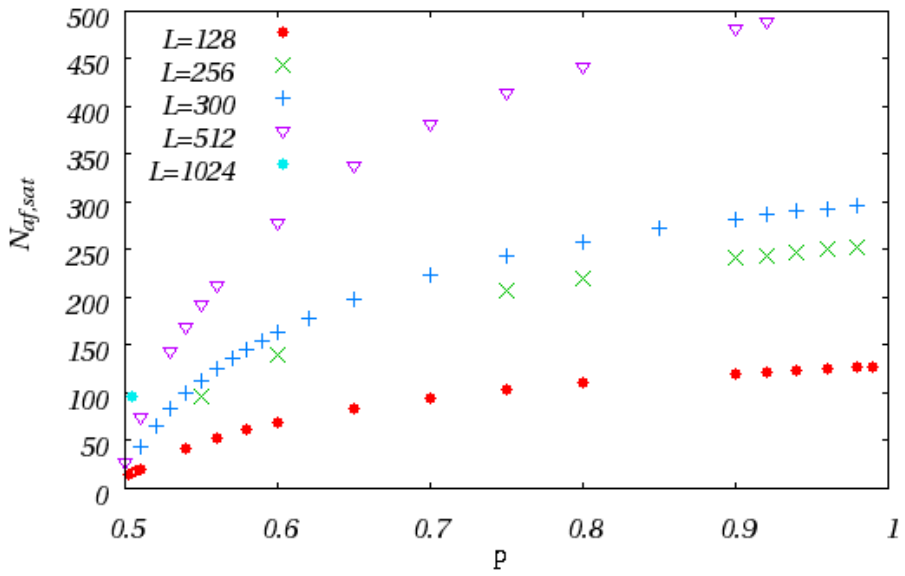


Figure 8.27 – Variations de $N_{af,sat}$ suivant p. Modèle MVC.

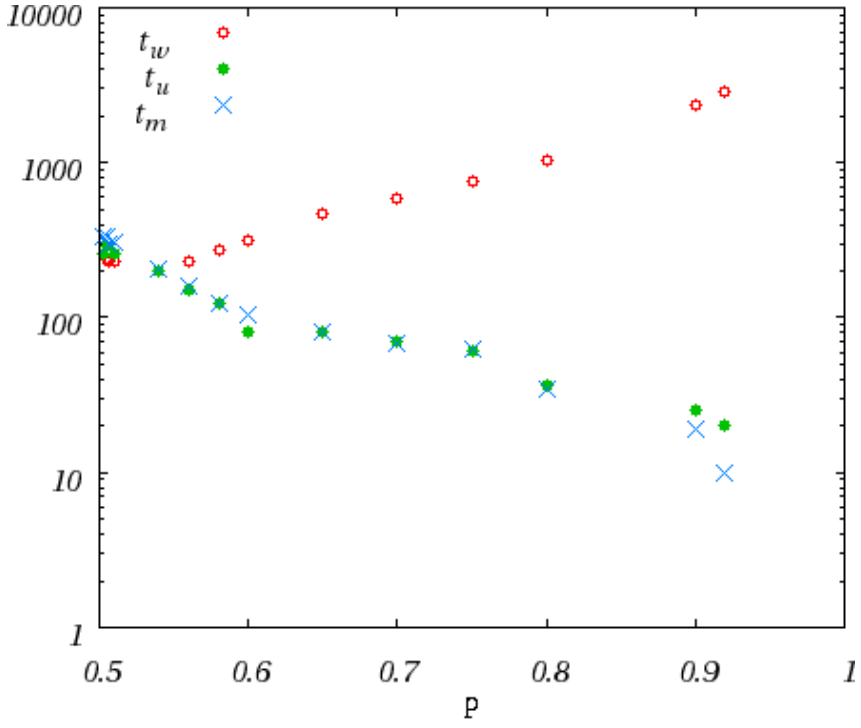


Figure 8.28 – Comparaison des temps de saturation pour U, W, m. Modèle MVC.

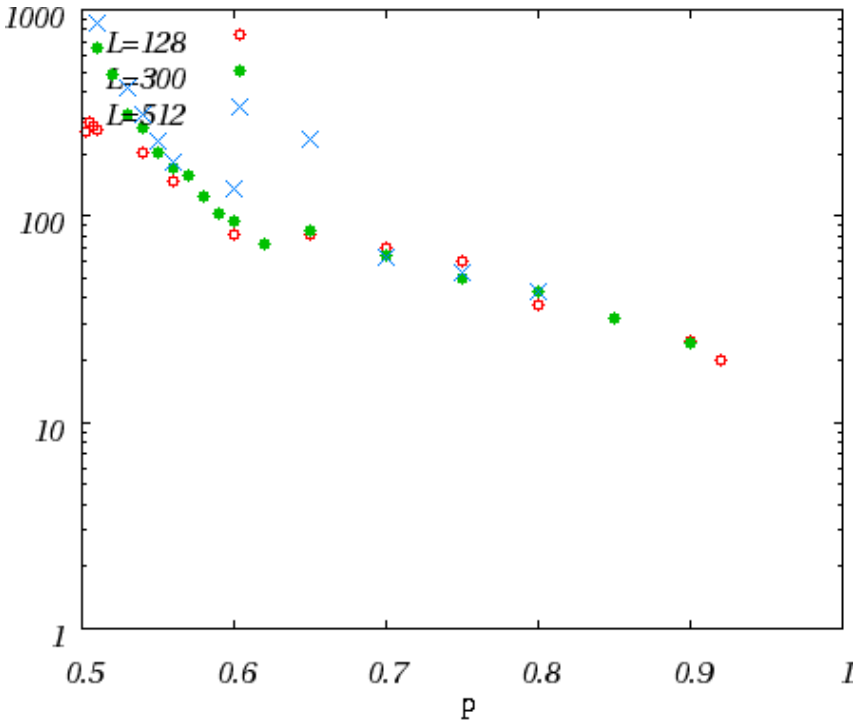


Figure 8.29 – Comparaison des temps de saturation pour U selon L_1. Modèle MVC.

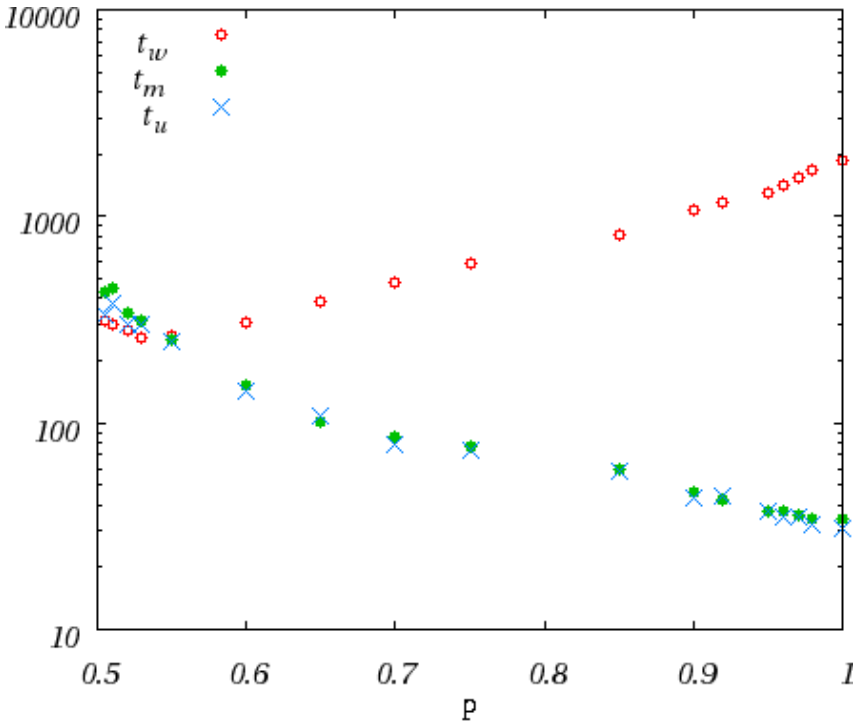


Figure 8.30 – Comparaison des temps de saturation pour U, W, m. Modèle MVV.

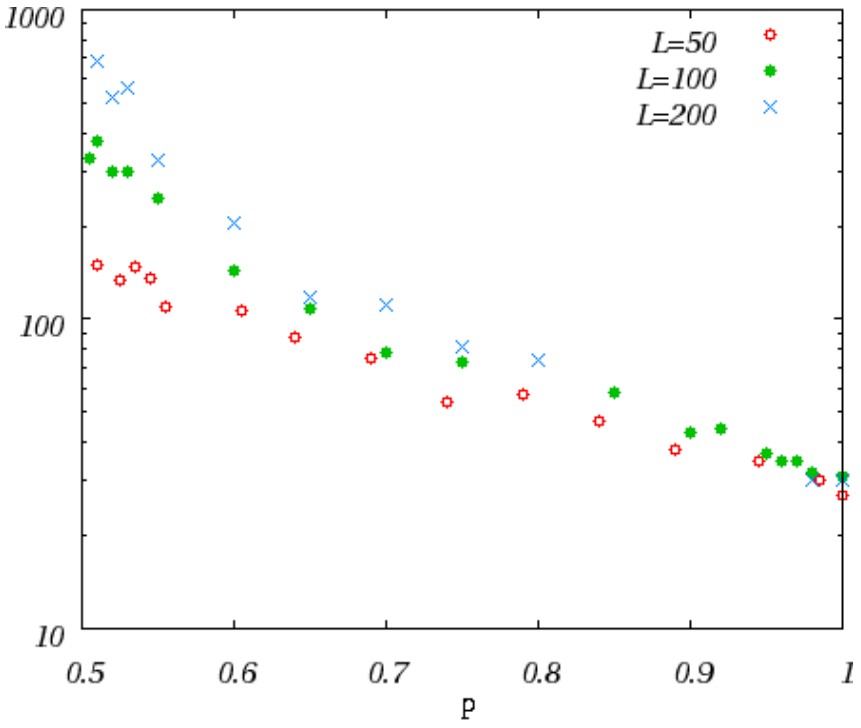


Figure 8.31 – Comparaison des temps de saturation pour U selon L_1. Modèle MVV.

Dépendance en L_1 des valeurs saturées

Des dépendances simples permettent parfois de regrouper les courbes établies pour différentes valeurs de L_1 en une seule (du moins sur une large plage de valeurs de p). Ceci est naturellement le cas, on l'a vu, pour la vitesse établie d'avancée du front U_{sat}.

Pour l'épaisseur saturée du front, il existe pour beaucoup de modèles de croissance un exposant de rugosité, noté habituellement α, tel que :

$$w_{sat} \sim L_1^{\alpha}$$

Dans le cas des modèles étudiés ici, cet exposant varie avec p (de $\simeq 0.4$ pour $p \to 1/2$ à $\simeq 0.5$ pour $p \to 1$). Cependant, cette dépendance peut être en partie traduite par la loi suivante (figure 8.32) :

$$w_{sat} \simeq L_1^{1/2} \phi_w \left((p - p_c) L_1^{0.18} \right) \tag{8.12}$$

Le taux de disparition de masse m_{sat} ainsi que le nombre de sites actifs appartenant au front N_{af} (pour ce dernier : dans le cas du modèle MVC) varient linéairement avec L_1, à valeur fixée de p et pour $p - p_c = \mathcal{O}(1)$. Ceci n'est plus vérifié lorsqu'on se rapproche du seuil. On observe donc les lois suivantes (figures 8.33 et 8.34) :

$$m_{sat}(L_1, p) = 2 L_1 \, \phi_m(p) \tag{8.13}$$

$$N_{af,sat}(L_1, p) = L_1 \, \phi_N(p) \tag{8.14}$$

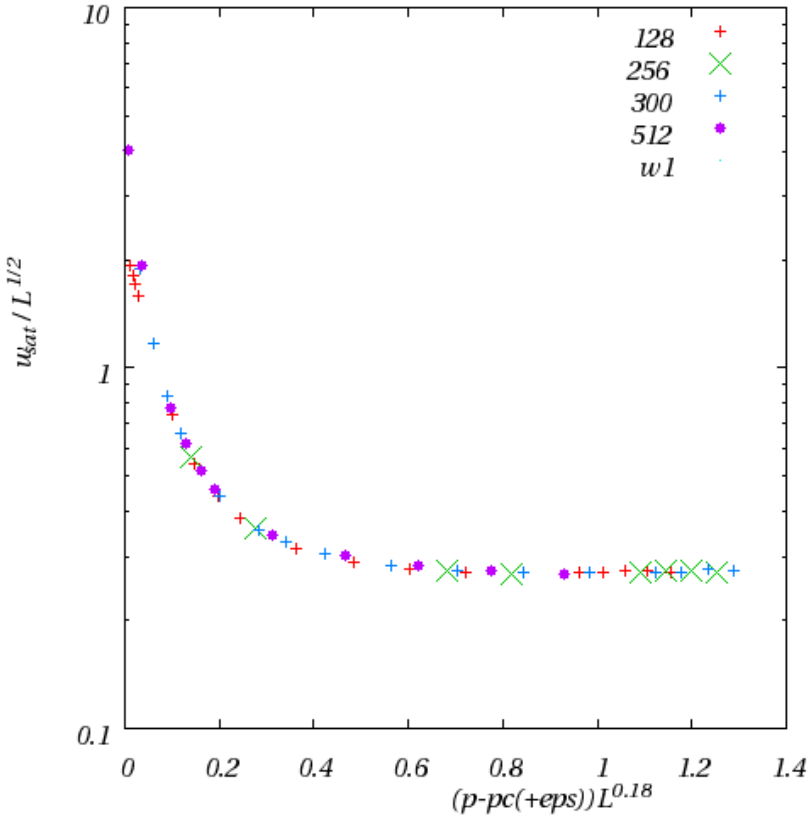


Figure 8.32 – Dépendance suivant p et L_1 de l'épaisseur saturée du front w_{sat}, explicitée via le tracé de $w_{sat}/L_1^{1/2}$ vs $(p-p_c)L_1^{1/5}$.

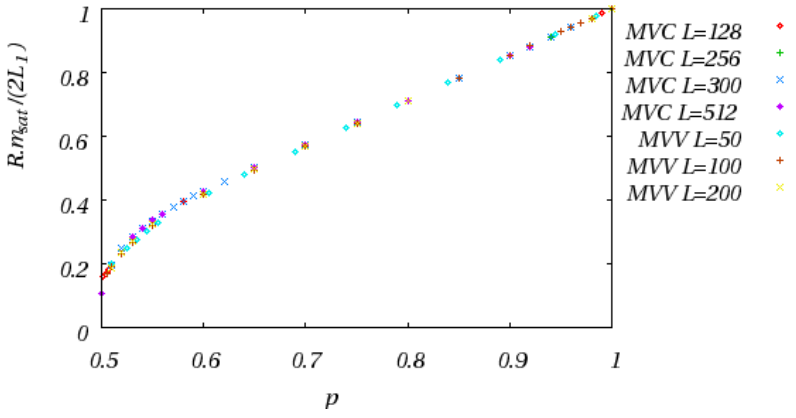


Figure 8.33 – Dépendance suivant p et L_1 du taux de disparition de masse m_{sat} (normalisé par un coefficient R permettant de rassembler les résultats des deux modèles MVC et MVV), explicitée via le tracé de $Rm_{sat}/(2L_1)$ vs p.

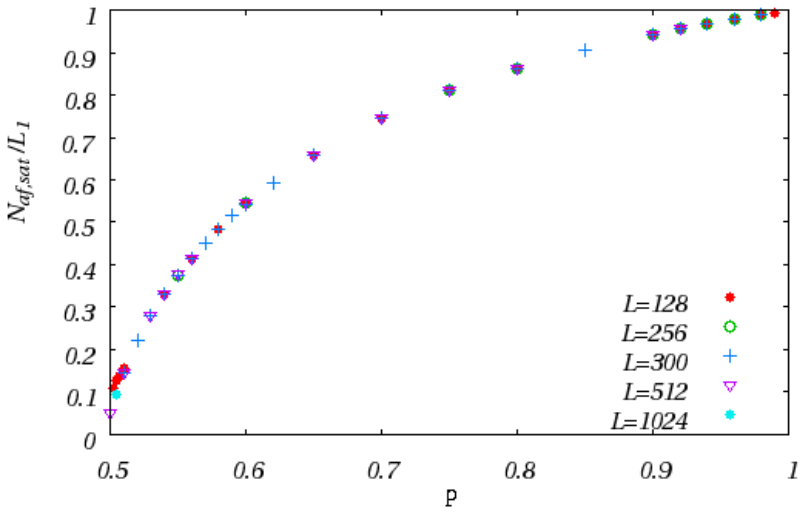


Figure 8.34 – Dépendance suivant p et L_1 du nombre d'éléments actifs sur le front $N_{af,sat}$ pour le modèle MVC, explicitée via le tracé de $N_{af,sat}/L_1$ vs p.

Comparaison de la vitesse et du taux de consommation

On confronte ici l'évolution de la vitesse du front U_{sat} aux valeurs du taux de consomation par unité de largeur de la masse du milieu $m_{sat}/(2\,L_1) \equiv N_{a,sat}/(2\,L_1)$ et du taux de consommation par unité de largeur de masse localisé au niveau du front $N_{af,sat}/L_1$ (Fig. 8.35).

On retrouve bien qu'à la limite $p \to 1$ toutes ces grandeurs sont identiques, lorsque la vitesse de parcours des liens est la même pour tous (MVC et MVV).

Le sens que peut avoir la comparaison des grandeurs portées sur la figure n'est pas nécessairement évident. Cependant, on peut en tirer quelques informations.

Pour une valeur $p_{NN} \simeq 0.53$ du paramètre d'ordre, le nombre d'éléments actifs au sein du front est égal au nombre d'éléments actifs hors du front (dans tout le reste du volume). La figure 8.36 montre le rapport du nombre de sites actifs en arrière de et sur le front. On constate que pour $p > p_{NN}$ la majorité des sites actifs constitue le front. Cette tendance est maximale au voisinage de $p \simeq 0.65$ et s'amenuise ensuite jusqu'à ce que les deux grandeurs deviennent de nouveau égales lorsque $p = 1$. Ce dernier point traduit le même fait que le facteur 2 intervenant dans la dépendance de N_a avec L, à savoir qu'à la limite $p \to 1$ les liens qui brûlent sont ceux du front et ceux de la colonne la plus avancée.

Au voisinage du seuil, lorsque $p < p_{NN}$, il y a par contre une majorité d'éléments actifs en arrière du front, traduisant l'existence d'un nombre croissant de régions du milieu accessibles uniquement de manières détournée.

On peut s'étonner de voir que $L_1 U > N_{af}$. Ceci traduit l'avancée du front par contributions latérales, c'est à dire que l'avancée du front est due non pas nécessairement à l'activité d'un élément au niveau du front là où il progresse, mais à l'activité d'éléments sur une ligne immédiatement au dessus ou au dessous de celle qui à un moment donné progresse.

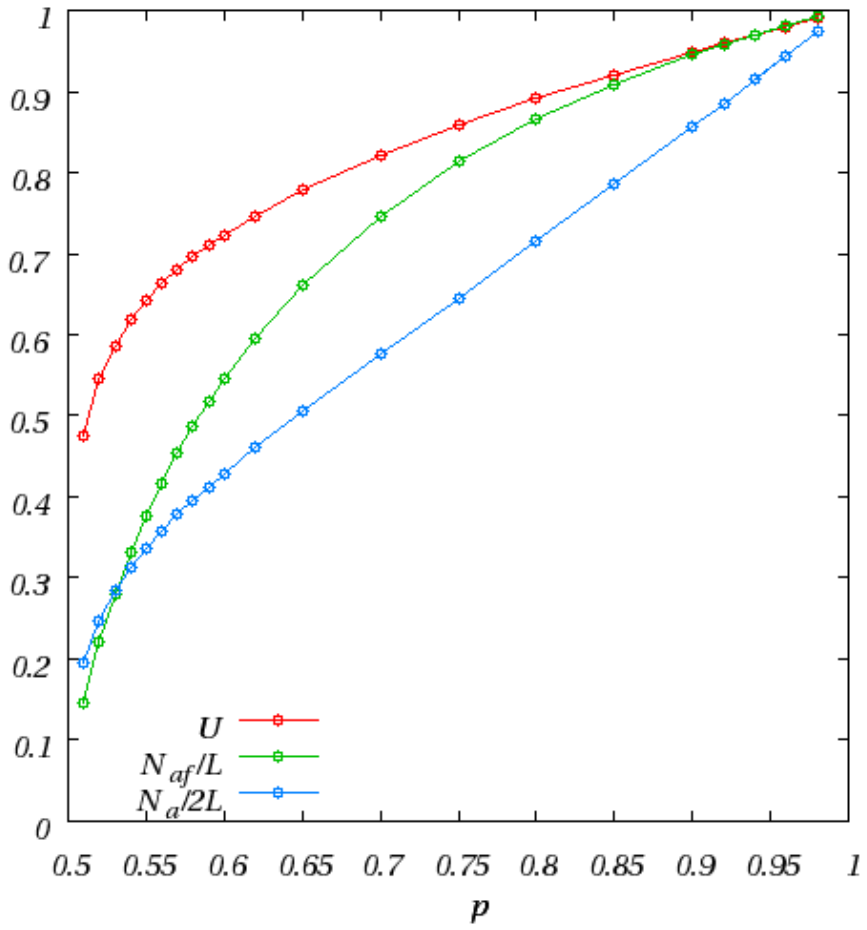


Figure 8.35 – Comparaison de U, $N_a/(2\,L_1)$ et N_{af}/L_1 pour le modèle MVC.

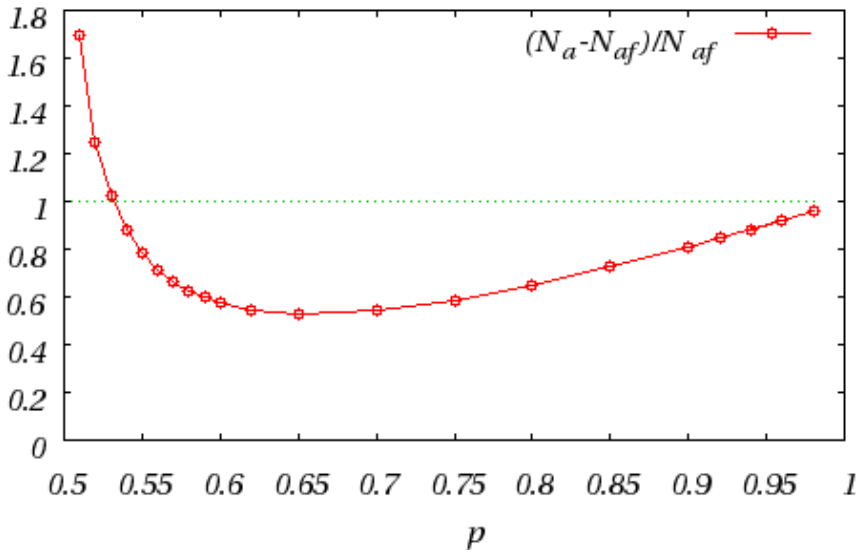


Figure 8.36 – Comparaison du nombre de sites actif sur et en deçà du front (MVC).

8.4.3 Comportement au voisinage du seuil : $p \to 1/2$

On tente ici de caractériser le comportement du front à proximité du seuil, à savoir lorsque $p \to 1/2$. On recherche ces dépendances de façon à traduire le comportement critique du système au seuil, c'est-à-dire qu'on recherche ces lois sous une forme typique de celles connues en percolation (lorsque $L_1 \gg \xi$) : des lois puissance par rapport à l'écart au seuil ($\sim |p - p_c|^\chi$), qui traduisent l'absence d'échelle de longueur de référence, puisqu'au seuil l'unique longueur de référence qu'est la longueur de corrélation ξ diverge.

On obtient pour U_{sat} la loi suivante :

$$U_{sat}(p \to 1/2) \sim (2p-1)^{1/5} \tag{8.15}$$

qui est valable pour les deux modèles MVC et MVV. On peut noter que cette loi a une validité quasi uniforme en p (figure 8.38).

On obtient pour w_{sat} et le modèle MVC :

$$w_{sat}(p \to 1/2) \sim L_1^{0.4}(p-1/2)^{-1.15} \tag{8.16}$$

et, pour m_{sat} et le modèle MVC toujours :

$$m_{sat}(p \to 1/2) \sim 2L_1(p-1/2)^{0.36} \tag{8.17}$$

Les courbes pour différentes valeurs de L_1 se supperposent pour des valeurs intermédiaires de p. Lorsqu'on s'approche du désordre faible, on s'éloigne des lois caractérisant le comportement au seuil, sans nécessairement que la courbe unique se divise. Lorsqu'au contraire on se dirige vers p_c, des dépendances en L_1 apparaissent, c'est-à-dire des effets de taille finie.

Pour les petites valeurs du groupement $(p - p_c)L_1^{1/\nu}$, on peut mettre en évidence la loi suivante (figure 8.40) :

$$w_{sat} \propto L_1 \Psi\left((p-1/2)L_1^{1/\nu}\right) \qquad \text{pour} \quad (p-p_c)L_1^{1/\nu} \leq 3 \tag{8.18}$$

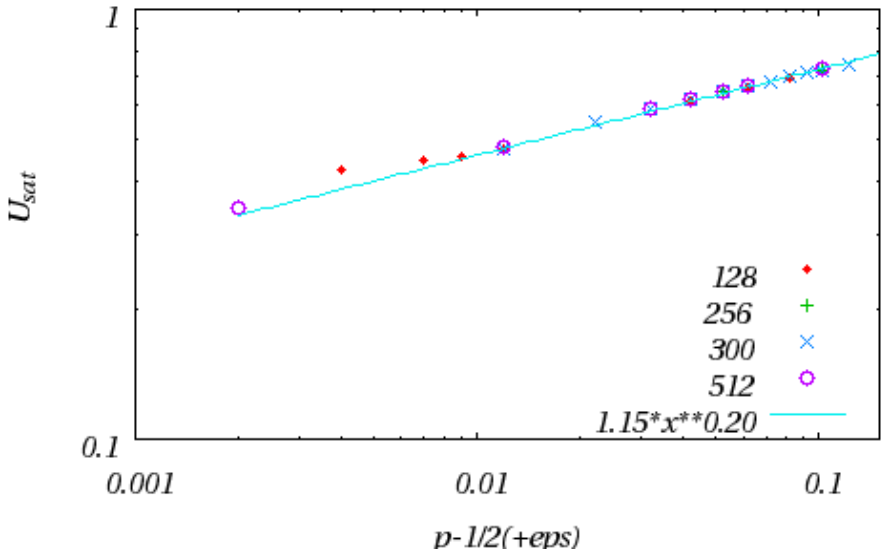


Figure 8.37 – Loi puissance pour U_{sat} au voisinage du seuil. Modèle MVC.

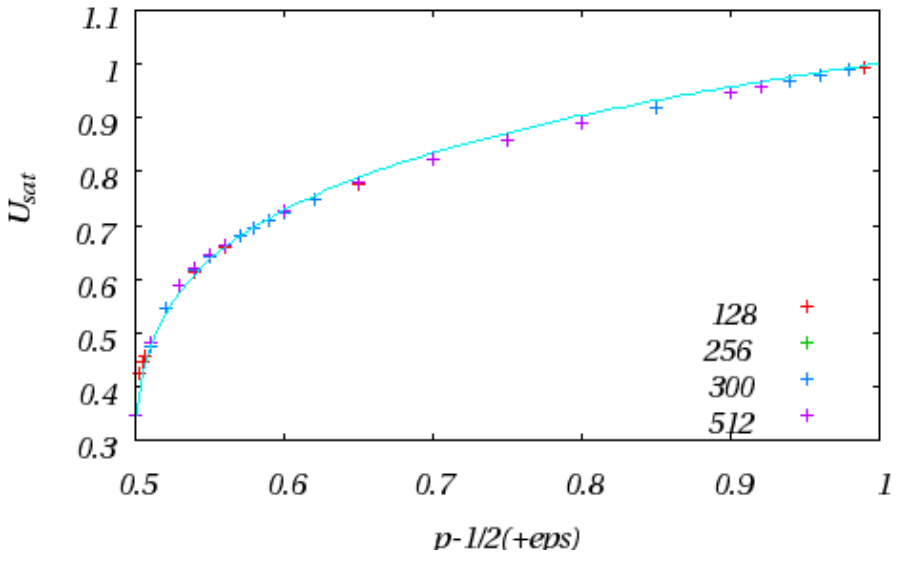


Figure 8.38 – Validité quasi globale de la loi puissance pour U_{sat}. Modèle MVC.

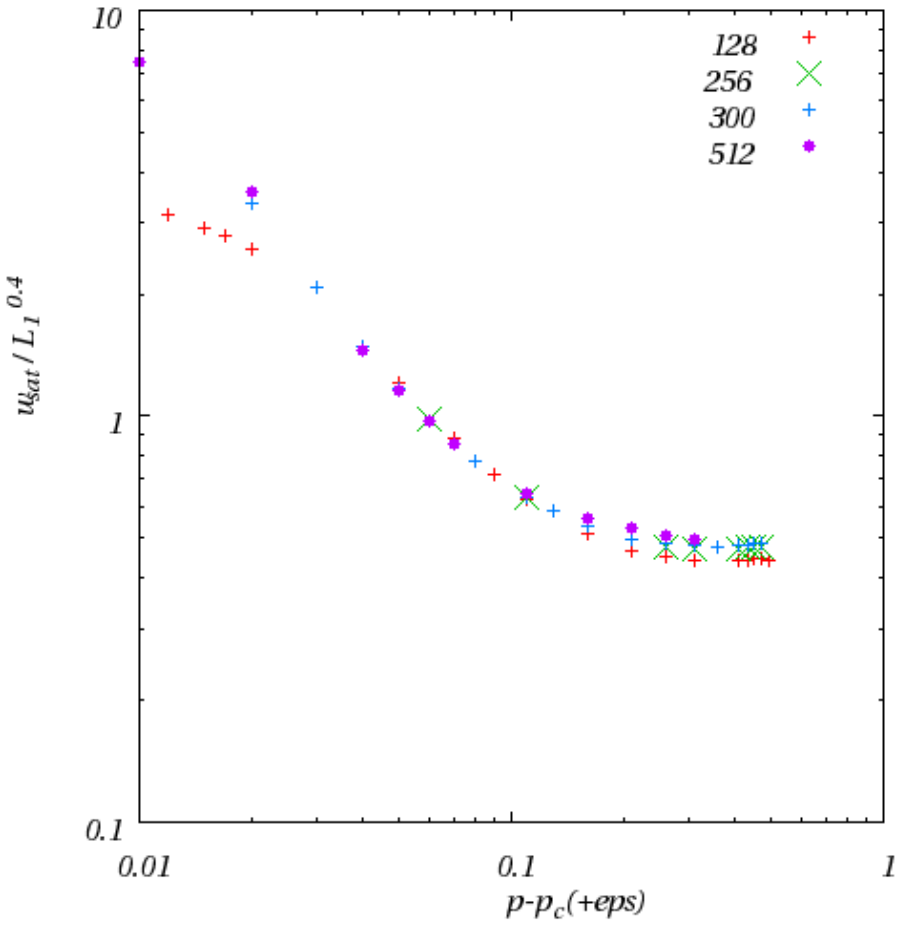


Figure 8.39 – $w_{sat}/L_1^{0.4}$ vs $(p - p_c)$ au voisinage du seuil. Modèle MVC.

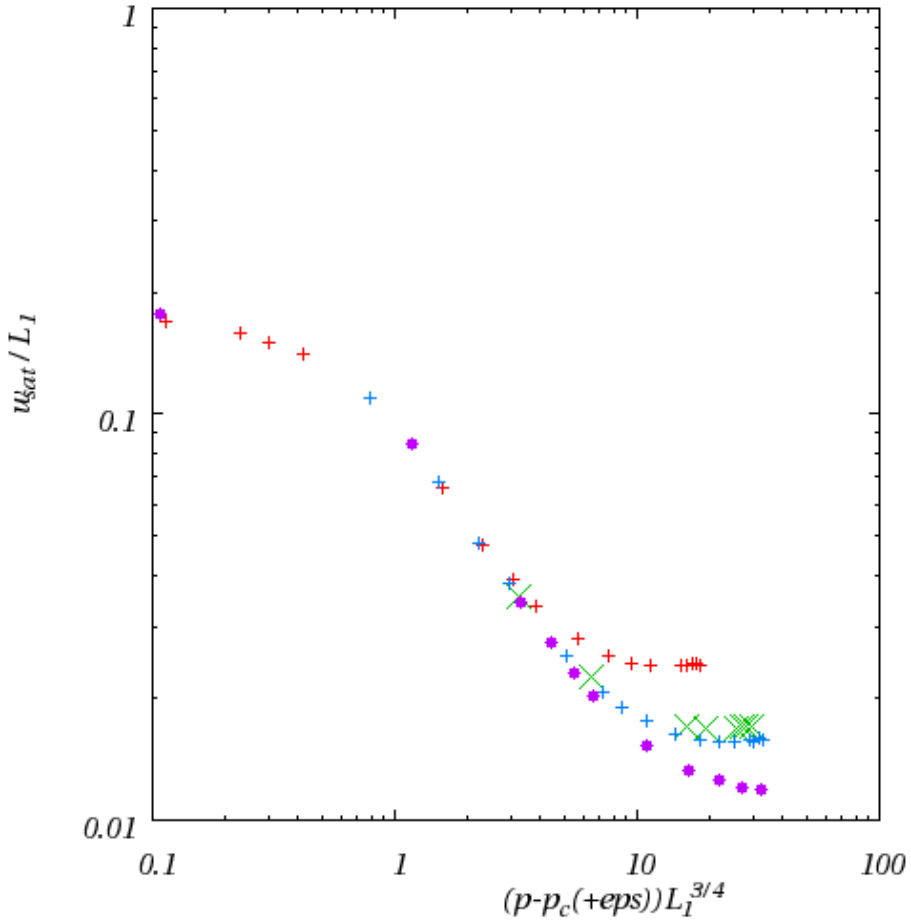


Figure 8.40 – w_{sat}/L_1 vs $(p - p_c)L_1^{1/\nu}$ au voisinage du seuil. Modèle MVC.

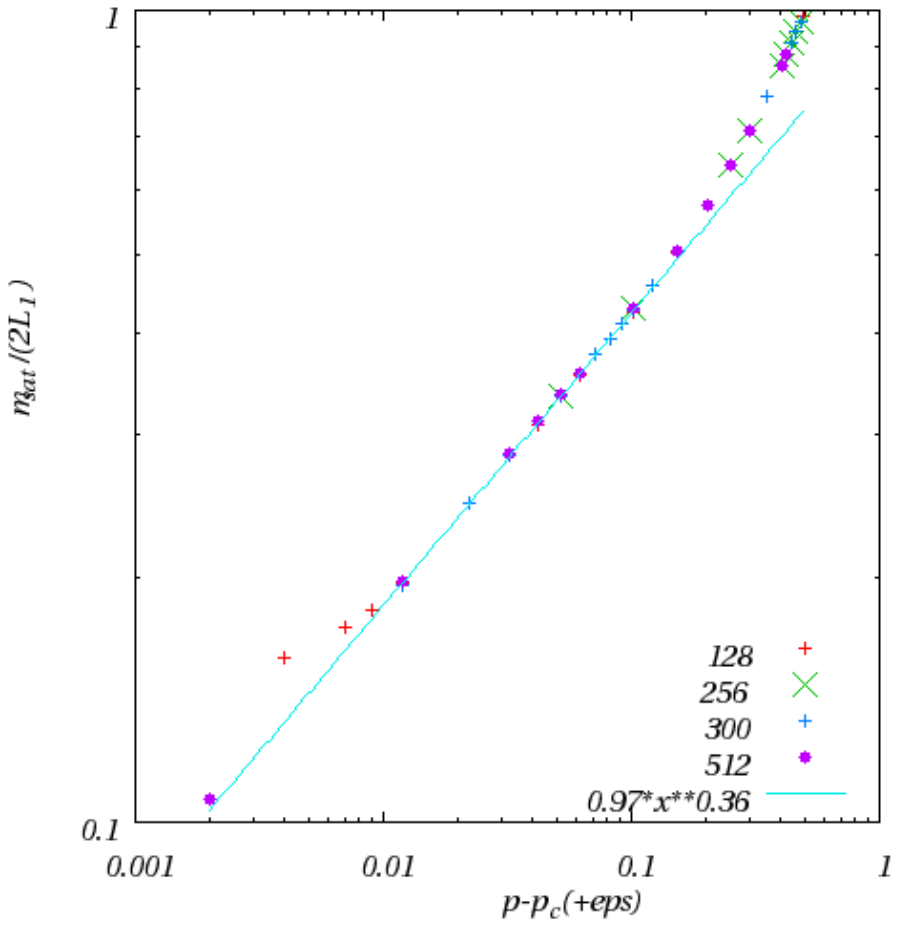


Figure 8.41 – $m_{sat}/(2L_1)$ vs $(p - p_c)$ au voisinage du seuil. Modèle MVC.

8.4.4 Cas limite du désordre faible : $p \to 1$

Lorsque le désordre devient faible, c'est-à-dire à la limite $p \to 1$, les grandeurs montrent des comportements remarquables, comme l'illustraient déjà les figures précédentes.

Plus précisément, on relève les lois suivantes :

$$U_{sat}(L_1, p \to 1) \simeq 1 + \frac{p-1}{2} \tag{8.19}$$

$$m_{sat}(L_1, p \to 1) \simeq 2L_1(1.43p - 0.43) \text{valable dès } p \simeq 0.62 \tag{8.20}$$

$$w_{sat}(L_1, p \to 1) \simeq 0.27\sqrt{L_1} \tag{8.21}$$

On remarque que la loi $w_{sat} \sim L^{1/2}$ s'identifie à celle que fournit le modèle KPZ pour un front $1d$.

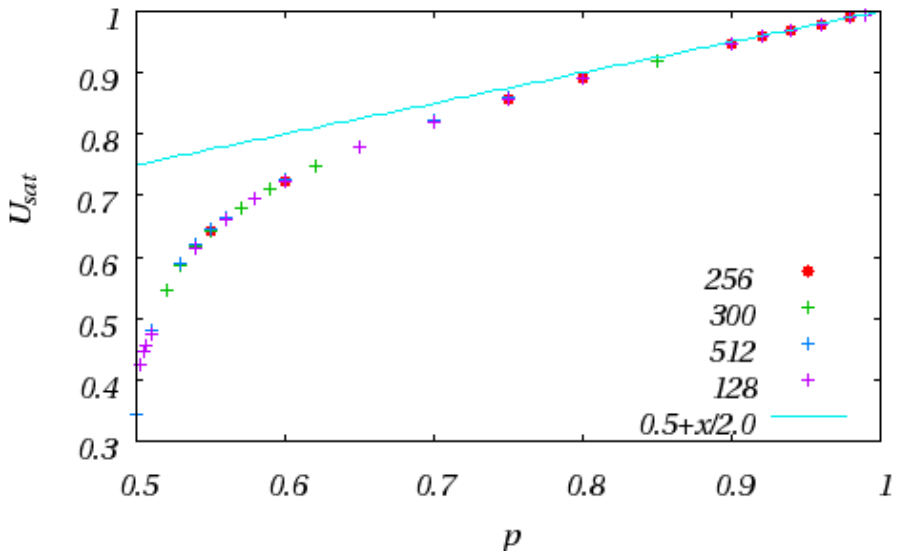


Figure 8.42 – U_{sat} à la limite du désordre faible. Modèle MVC.

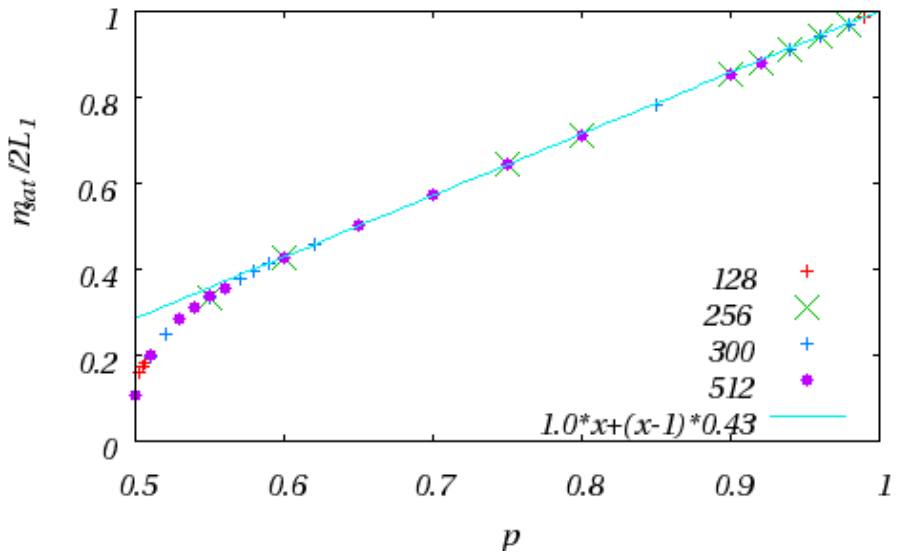


Figure 8.43 – $m_{sat}/(2L_1)$ à la limite du désordre faible. Modèle MVC.

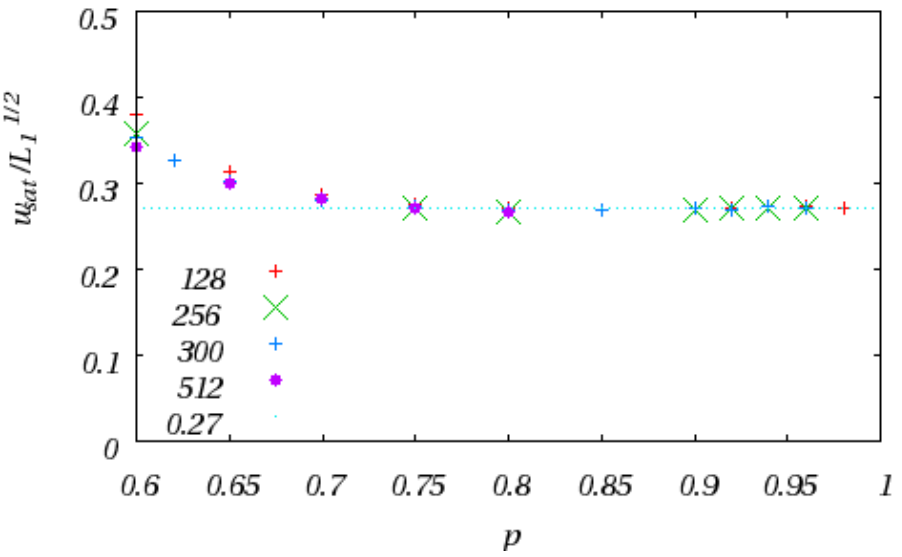


Figure 8.44 – $w_{sat}/\sqrt{L_1}$ à la limite du désordre faible. Modèle MVC.

8.5 Synthèse et conclusion

Il est possible de bâtir un modèle dynamique de percolation de lien à partir des caractéristiques de la propagation d'une flamme unique sur un canal de composition et/ou réactivité, le caractère passant ou non des liens étant relié à un critère de coincement ($L < L_Q$).

Deux modèles ont été étudiés par des méthodes statistiques : l'un considérant un réseau de liens où la vitesse locale de la flamme ne dépend pas du lien, du moment qu'il est passant (MVC) ; l'autre s'intéressant à l'impact des inhomogénéités de vitesse locales de la flamme – d'un lien à un autre – sur la propagation du front d'invasion (MVV).

Une conclusion d'importance est que, à un facteur près permettant de faire correspondre les résultats des deux modèles à la limite $p \to 1$, les deux modèles présentent un comportement identique sur une très large plage de valeurs de p. Seule la proximité du seuil de percolation révèle un écart entre les deux modèles. Ceci illustre l'importance prédominante de la structure globale du milieu face à ses caractéristiques locales (largeurs des canaux), qui semblent n'avoir pour rôle que de fixer quantitativement les propriétés moyennes de la propagation.

On a par ailleurs déterminé l'évolution des principales grandeurs caractérisant le problème : vitesse du front précurseur, taux de consommation du réactif, épaisseur du front d'invasion. Une propagation stationnaire en moyenne apparaît pour des domaines d'étude suffisamment longs et à la suite d'un régime transitoire. Ce régime est dit saturé, en référence à la saturation de l'épaisseur w du front. Les temps caractéristiques de l'apparition du régime saturé ont également été déterminés pour différentes grandeurs, montrant des évolutions avec p différentes pour U_{sat} (la saturation apparaît plus tôt dans le cas d'un désordre faible) et pour w_{sat} (le temps de saturation semble diverger dans le cas du modèle MVC à l'approche de $p = 1$).

L'influence de la taille du domaine a été mise à jour et pu être exprimée – au moins sur une plage de valeurs de p – d'après des lois simples.

Chapitre 9

Conclusion générale

Ce mémoire présente la construction d'un modèle de combustion en milieu solide désordonné, et les premiers résultats auxquels il conduit.

Il s'agit d'un modèle très simplifié, exploitant deux caractéritiques propres au désordre et qui sont d'une part l'inhomogénéité du milieu, et d'autre part le caractère aléatoire de la répartition de ces inhomogénéités. On s'intéresse notamment à montrer le rôle prédominant que peut jouer le désordre structurel du milieu sur la combustion.

La description exhaustive de la combustion dans un milieu solide désordonné doit considérer l'ensemble des phénomènes thermiques, chimiques, diffusifs, qui conduisent une flamme à s'auto-entretenir et se propager dans le milieu, soumise aux détours d'une géométrie complexe. L'idée que l'on tente de mettre en avant dans ces travaux, est que les phénomènes complexes précédemment cités ne contrôlent pas la propagation à grande échelle de la flamme. Celle-ci est soumise avant tout à des aspects géométriques. Les phénomènes physico-chimiques mis en jeu localement par la combustion permettent de définir les chemins auxquels l'avancée de la flamme est réduite, et la façon dont elle y évolue : c'est leur seule contribution. Ces chemins une fois définis, la propagation de la flamme dans le milieu et à grande échelle ne dépend plus que du réseau de chemins mis en évidence. La percolation se présente alors comme un concept approprié pour décrire cette propagation.

On s'est donc intéressé dans la première partie de ce mémoire à définir des chemins – que l'on appelle canaux – et à déterminer l'existence, la forme et la vitesse des flammes se propageant sur ces canaux, en lien avec leur nature et leur profil. On a ainsi montré au chapitre 3 plusieurs résultats intéressants par le biais d'une étude asymptotique de la flamme de canal. Cette étude a d'abord permis d'obtenir une équation pour la forme du front de flamme courbe, à partir de laquelle on en vient à s'intéresser à des fronts paraboliques. Un second point tout à fait important est la mise en évidence d'une correspondance entre variations de réactivité et variations de composition du milieu. Si des variations de réactivité étaient plus simples à considérer pour mener l'étude, le cas des variations de composition est physiquement plus répandu. L'étude montre que ces deux types d'inhomogénéités agissent de manière similaire et que des variations de composition peuvent s'interpréter comme des variations de réac-

tivité effective. Troisième point et peut-être le plus important : des variations de composition même faibles ($\mathcal{O}(1/\beta)$) suffisent à définir un canal, car elles interviennent avec un facteur β dans un terme exponentiel ! (Fig. 9.2)

On insiste sur le fait que ce n'est pas tant la quantité de réactif que l'inhomogénéité de sa répartition qui est importante. On a vu au chapitre 2, par exemple, qu'une solution en milieu homogène existe $\forall g > 0$, même si celle-ci est faible. Ce sont les variations de $g(x, z)$ transverses au canal (i.e. suivant z dans les coordonnées utilisées en première partie) qui comptent.

Au cours du chapitre 4, on s'est intéressé à un modèle à fonction-δ grâce auquel on détermine une solution exacte en 2d comme en 3d, de forme parabolique pour l'une et paraboloïdale pour l'autre. Ce modèle se révèle d'une grande précision, une fois confronté à des simulations numériques directes. Il a permis entre autre d'accéder aux courbes de réponse statique des solutions mises en évidence, lesquelles courbes définissent une largeur critique de canal en deça de laquelle une flamme ne peut se propager.

Il est important pour la construction du modèle de percolation de connaître tous les aspects du comportement d'une flamme dans un canal unique. Celle-ci est soumise à une instabilité de nature thermique-chimique que l'on approche au chapitre 5 par une étude linéaire de stabilité, restreinte à un front plan, ainsi que par des simulations numériques.

De nombreuses simulations numériques directes ont été menées, auquelles ont été confrontés les résultats des modèles établis au cours des premiers chapitres.

À l'issue de cette première partie, on peut donc conclure que des variations de composition comme de réactivité du milieu définissent des canaux. Si ceux-ci sont trop étroits ($L < L_Q$) la flamme ne peut s'y propager et s'éteint. Ce comportement est indépendant de la forme du canal, qu'il soit "plat" ou possède une courbure. Ceci n'influence que la forme et la vitesse de la flamme s'y propageant. De même, les instabilités de la flamme ne semblent pas devoir remettre en cause les conclusions de l'étude, et conduisent à un comportement moyen dans la continuité de celui de la flamme stationnaire.

On dispose alors de conclusions robustes (9.1), à partir desquelles est bâti un modèle dynamique de percolation de lien. Le milieu désordonné est alors

réduit au squelette de chemins *a priori* accessibles à une flamme, représenté ici par un réseau carré de liens. Selon la largeur de ces canaux, on sait qu'une flamme peut s'y propager ou non et à quelle vitesse, en correspondance avec une courbe de réponse statique. Deux modèles ont été étudiés. Dans le premier, les canaux trop étroits sont distribués aléatoirement sur le réseau en proportion $1-p$. Les liens correspondants sont alors coupés. La vitesse de la flamme a été prise constante égale à 1 pour tous les canaux restants, qui sont par ailleurs tous d'une même longueur. Un second modèle considère une distribution des largeurs des canaux suivant une pdf proche d'une Gaussienne, centrée sur une largeur supérieure à L_Q. Les canaux de largeur inférieure à L_Q correspondent alors à des liens coupés, tandis que les autres sont passant, mais ne sont plus consommés à la même vitesse, laquelle est obtenue d'après la courbe de réponse statique.

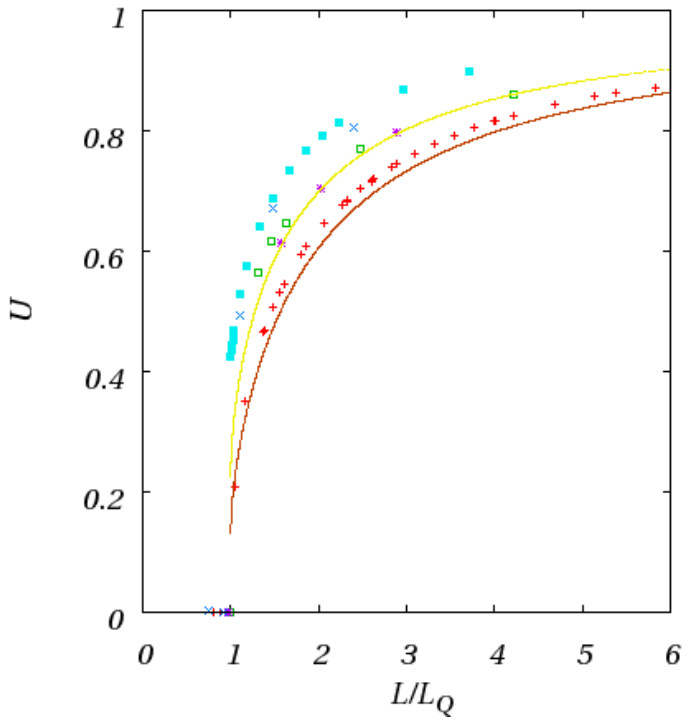


Figure 9.1 – Courbes de réponse statique présentées lors des chapitres précédent, tracées ici en fonction de L/L_Q. La valeur de L_Q est approximative, du fait d'une extinction prématurée.

Une conclusion importante à l'issue de l'exploitation de ces modèles est que la différence de résultats entre les deux modèles est petite. Ceci a pour conséquence qu'un modèle aussi simple que celui à vitesse constante est suffisant pour décrire la propagation de la flamme au sein du milieu désordonné. Les seules données nécessaires sont des caractéristiques moyennes, qui donnent un facteur correctif sur la valeur fournie par le modèle à vitesse constante. On peut remarquer ici que, en pratique, les chemins accessibles à une flamme au sein d'un milieu désordonné n'ont aucune raison d'être de même longueur. Ceci n'est en fait pas une restriction : changer la longeur revient à changer le temps de parcours et donc à considérer une vitesse effective et des liens de longueur encore constante.

L'étude du modèle à vitesse constante semble donc dans une large part suffisante. Elle a permi entre autres déterminations d'obtenir les courbes de vitesse moyenne du front d'invasion et du taux de consommation selon la proportion p de canaux viables.

Des approfondissements et travaux en perspectives de cette étude apparaissent naturellement. Le modèle MVC présenté ici n'a pas été entièrement exploité. On s'est principalement intéressé aux temps longs, c'est à dire aux régimes saturés. Cependant, les valeurs du rapport L_2/L_1 nécessaires pour atteindre ces régimes vont de ~ 5 lorsque p est voisin de p_c à plus de 100 lorsque l'on tend vers un désordre faible. Une contre-remarque peut être faite également : les temps de saturation apparaissent moindres dans le cas du modèle à vitesse variable, ce que l'irrégularité du réseau sous-jacent pour des milieux réels pourrait accentuer. Dans tous les cas, il semble important d'approfondir les régimes transitoires.

Un aspect important dans l'établissement et la pertinence d'un modèle de percolation est la notion de "relation" entre des éléments du milieu : c'est elle qui permet de décréter que certains éléments forment des amas, qu'ils sont en interaction. Au delà de cette notion, il y a donc celle de portée des phénomènes étudiés. Dans le cadre du modèle que l'on bâtit ici, des interactions entre liens non connectés pourraient exister : il n'est pas exclu que la combustion d'un lien puisse en préchauffer un autre et modifier ainsi la vitesse à laquelle il est consommé, voire même qu'une flamme puisse y apparaître, par une sorte

d'effet tunnel. Il serait intéressant de considérer la prise en compte de ces phénomènes liés aux transferts de chaleur. L'influence des pertes de chaleur devrait également être considérée, d'autant plus qu'elles ne devraient avoir d'influence que localement, c'est à dire non pas sur le modèle de percolation lui-même, mais sur les relations U, L considérées.

Il serait intéressant, à présent, de travailler à mettre en évidence le réseau sous-jacent que l'on peut associer à un paysage donné de concentration en réactif, et d'en extraire les caractéristiques transposables à un réseau régulier.

Une expérience intéressante mais difficilement envisageable serait de confronter les résultats du modèles de percolation au calcul DNS de propagation d'une flamme sur un paysage de réactivité/composition donné. L'éventualité d'un tel calcul est cependant peu réaliste : cela nécessiterait de se restreindre à un milieu de très petite taille et d'avoir à disposition des centaines de processeurs. Une configuration pour laquelle le front d'invasion est mince permettrait de n'avoir à considérer qu'une bande réduite du milieu au cours du calcul : l'arrière étant entièrement brûlé.

On note finalement que depuis quelques temps [25][24], on est capable d'intégrer l'hydrodynamique à l'étude de flammes de canal. Ceci permettra à terme de mimer les flammes triples (9.3) dans un nuage de gouttelettes de fuel en cours d'évaporation dans l'air, les voisinages des lignes stœchiométriques jouant le rôle de liens.

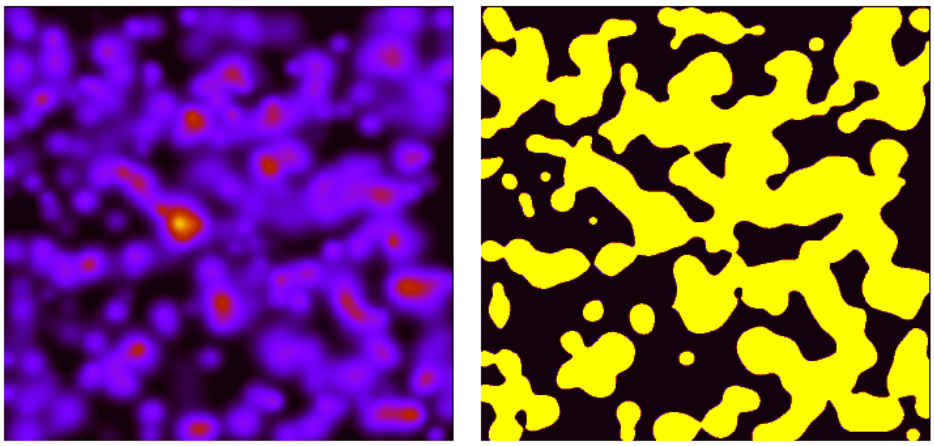


Figure 9.2 – À gauche : paysage de composition $a(x, y)$; à droite : $\exp(\beta(a(x, y) - 1))$ avec seuillage ; ou comment un paysage de composition anodin peut suffire à définir des canaux.

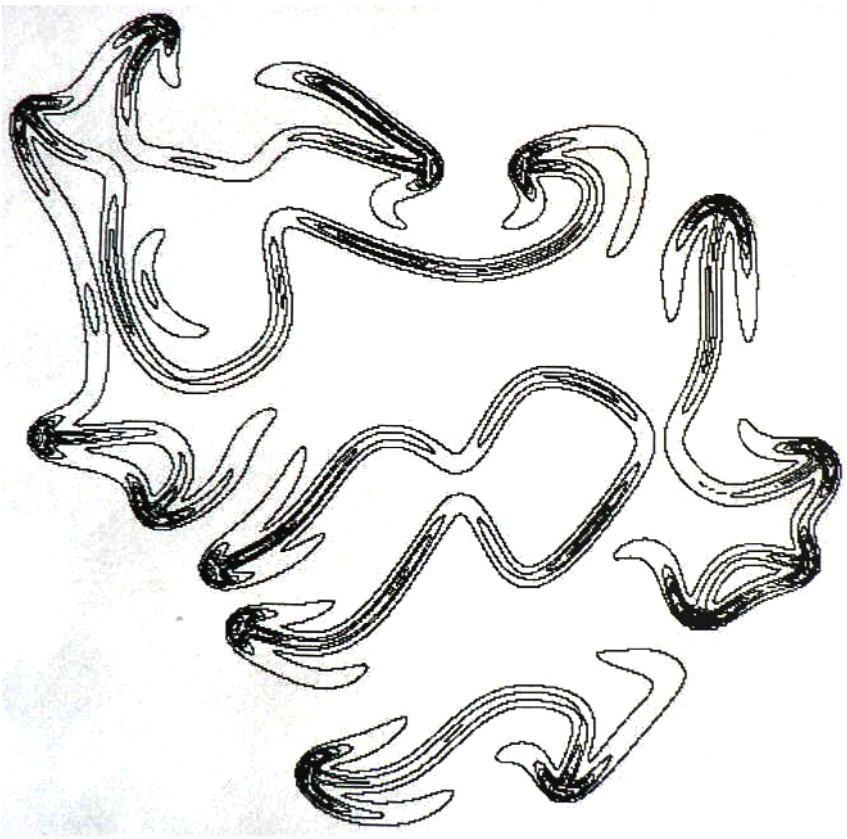


Figure 9.3 – Flammes triples se propageant le long des lignes stœchiométriques au sein d'un milieu turbulent mal mélangé, obtenues par simulation numérique directe (reproduction d'après [47], avec l'aimable autorisation de L. Vervisch)

Annexe A

Noyau de Green de l'opérateur d'advection-diffusion

On s'intéresse ici à la forme de la fonction de Green associée à l'opérateur d'advection-diffusion. On rappelle que cette fonction permet de déterminer la solution du problème non homogène, c'est-à-dire avec second membre, grâce au principe de superposition.

Plus précisément, la fonction de Green $G(x,z)$ à laquelle on s'intéresse est la solution de l'équation à deux dimensions :

$$UG_x = \epsilon \boldsymbol{\nabla}^2 G + \delta(x)\delta(z) \tag{A.1}$$

et peut être interprétée comme la réponse du système à une source ponctuelle unité, située à l'origine. Elle s'écrit [32] :

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\epsilon} e^{Ux/2\epsilon} K_0\left(\frac{U|\mathbf{x}|}{2\epsilon}\right) \tag{A.2}$$

L'expression de $\mathcal{G}$ utilise la fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce et d'ordre zéro $K_0(s)$, solution de l'équation :

$$y'' + \frac{1}{s}y' - y = 0 \tag{A.3}$$

et qui a entre autres propriétés, outre d'être singulière à l'origine :

$$K_0(\infty) = 0 \tag{A.4}$$

$$K_0(s \ll 1) = -\log s + \gamma_E + \mathcal{O}(s^2) \tag{A.5}$$

$$K_0(s \gg 1) \sim \frac{e^{-s}}{\sqrt{s}} \tag{A.6}$$

La solution $\mathcal{G}$ présente donc les comportements asymptotiques suivants :

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) \sim \frac{-1}{2\pi\epsilon} \log\left(\frac{U|\mathbf{x}|}{2\epsilon}\right) \qquad \text{pour} \quad |x| \to 0 \tag{A.7}$$

$$\mathcal{G}(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{2\pi\epsilon} \left(\frac{U|\mathbf{x}|}{2\epsilon}\right)^{-1/2} e^{U(x+|\mathbf{x}|)/2\epsilon} \qquad \text{pour} \quad |x| \to \infty \tag{A.8}$$

On note particulièrement :
– une décroissance exponentielle (en $e^{Ux/\epsilon}/\sqrt{|\mathbf{x}|}$) pour $Ux < 0$ dans la direction de U ;
– une décroissance beaucoup plus lente (en $1/\sqrt{|\mathbf{x}|}$) pour $Ux > 0$.

À travers le paramètre ϵ, on saisit la raideur de l'amortissement que présente $\mathcal{G}$ pour l'équation en fraction massique du réactif ($\epsilon \equiv 1/Le$).

Les unités de l'équation correspondent à celles considérées dans le corps du mémoire, c'est à dire l'épaisseur de flamme l_T.

On a représenté sur la figure ci-dessous les courbes isovaleurs de $\mathcal{G}$. Toutes ces informations montrent l'influence négligeable des évènements en aval de la flamme courbe sur le comportement à son nez.

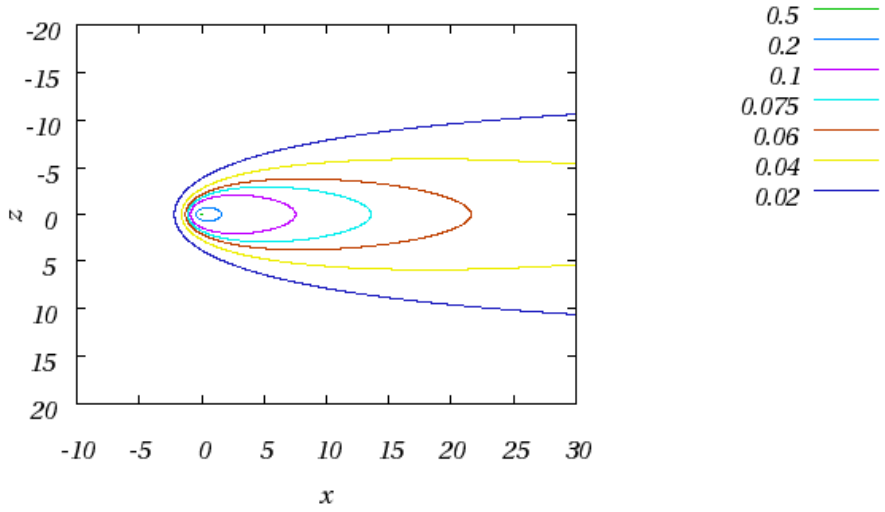


Figure A.1 – Contours isovaleurs de la fonction de Green $\mathcal{G}$ associée à l'équation d'advection-diffusion.

Il est par ailleurs possible d'avoir un modèle incorporant l'hydrodynamique grâce à un changement de variable dû à Boussinesq. En effet, si l'on remplace le terme UG_x dans (A.1) par un terme d'advection au sein d'un écoulement potentiel de vitesse $\mathbf{u} = U\boldsymbol{\nabla}\phi$ (où $\boldsymbol{\nabla}^2\phi = 0$) et que l'on considère le changement de variables $(x, y) \leftrightarrow (\phi, \psi)$ (ψ désignant la conjuguée harmonique de ϕ), on se ramène à une équation similaire à (A.1) exprimée en variables (ϕ, ψ).

Le potentiel ϕ pourrait par exemple correspondre à l'écoulement induit dans le milieu frais par un solide (virtuel) de forme... parabolique.

On donne ci-dessous l'expression d'autres fonctions de Green, pouvant par exemple servir à une étude des phénomènes instationnaires. Les deux premières considèrent un milieu bidimensionnel, tandis que la troisième vaut pour un cas

monodimensionnel. La vitesse U apparaissant dans le deux derniers cas est une fonction du temps t.

$$\left\{\begin{array}{rcl} G_t & = & \epsilon\boldsymbol{\nabla}^2 G + \delta(x-x')\delta(z-z')\delta(t-\tau) \\ G & \equiv 0 & \text{pour } t < \tau \\ G & = & \frac{1}{4\pi\epsilon(t-\tau)} e^{-\frac{(x-x')^2+(z-z')^2}{4\epsilon(t-\tau)}} \end{array}\right. \tag{A.9}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} G_t + UG_x & = & \epsilon\boldsymbol{\nabla}^2 G + \delta(x-x')\delta(z-z')\delta(t-\tau) \\ G \equiv 0 & & \text{pour } t < \tau \\ G & = & \frac{1}{4\pi\epsilon(t-\tau)} e^{-\frac{(x-x'-\int_\tau^t U(\sigma)d\sigma)^2+(y-y')^2}{4\epsilon(t-\tau)}} \end{array}\right. \tag{A.10}$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} G_t + UG_x & = & \epsilon G_{xx} + \delta(x)\delta(t-\tau) \\ G \equiv 0 & & \text{pour } t < \tau \\ G & = & \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon(t-\tau)}} e^{-\frac{(x-x'-\int_\tau^t U(\sigma)d\sigma)^2}{4\epsilon(t-\tau)}} \end{array}\right. \tag{A.11}$$

Toutes, ainsi que (A.1), se déduisent par translation/intégration de (A.10).

Annexe B

Modèle à fonction-δ en milieu diffusif ($Le < +\infty$)

On montre ici qu'il est possible d'expliciter une fois encore une solution du modèle à fonction-δ, en tenant compte cette fois de la diffusion de la matière ($Le < +\infty$).

Le système d'équations initial s'écrit :

$$U\theta_x = \boldsymbol{\nabla}^2\theta \qquad + w(a,\theta,z) \tag{B.1}$$

$$Ua_x = \frac{1}{Le}\boldsymbol{\nabla}^2 a - w(a,\theta,z) \tag{B.2}$$

Les conditions de saut à travers la zone réactive deviennent [7] :

$$[\![\theta]\!] = 0 \tag{B.3}$$

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}\theta]\!] = \frac{-1}{Le}[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}a]\!] = \overline{W} \tag{B.4}$$

dans les mêmes notations que le chapitre 4.

On considère les coordonnées paraboliques ξ, η également définies au cours du chapitre 4 et on recherche une solution ne dépendant que de la variable ξ, le front étant en ξ_F.

L'équation pour θ prend exactement la même forme que dans le modèle à $Le = +\infty$, tandis que l'équation pour a devient analogue à celle en θ, au changement de U en ULe près. Ces deux équations s'intègrent alors sous la forme :

$$\theta(\xi) = \theta_F \frac{\int_\xi^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda}}{\sqrt{\lambda}} d\lambda}{\int_{\xi_F}^{+\infty} \frac{e^{-U\lambda}}{\sqrt{\lambda}} d\lambda} \tag{B.5}$$

$$a(\xi) = 1 - \frac{\int_\xi^{+\infty} \frac{e^{-ULe\lambda}}{\sqrt{\lambda}} d\lambda}{\int_{\xi_F}^{+\infty} \frac{e^{-ULe\lambda}}{\sqrt{\lambda}} d\lambda} \tag{B.6}$$

compte-tenu des conditions aux limites :

$$\theta(+\infty) = 0,\ a(+\infty) = 1,\ \theta(\xi_F) = \theta_F,\ a(\xi_F) = 0$$

Les sauts des gradients suivant la normale au front s'écrivent :

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}\theta]\!] = \frac{d\theta}{d\xi}\sqrt{\frac{\xi_F}{\xi_F + \eta}} \tag{B.7}$$

$$[\![\mathbf{n}.\boldsymbol{\nabla}a]\!] = \frac{da}{d\xi}\sqrt{\frac{\xi_F}{\xi_F + \eta}} \tag{B.8}$$

Des conditions de saut on tire d'une part :

$$\theta_F = \frac{1}{Le}\frac{e^{-ULe\xi_F}}{e^{-U\xi_F}}\frac{\int_{\xi_F}^{+\infty} e^{-U\xi}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}}{\int_{\xi_F}^{+\infty} e^{-ULe\xi}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}} \tag{B.9}$$

et d'autre part :

$$\frac{1}{Le^2}\frac{e^{-2ULe\xi_F}/\xi_F}{\left(\int_{\xi_F}^{+\infty} e^{-ULe\xi}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}\right)^2}\frac{1}{1+\eta/\xi_F} = g(z)\frac{F(\theta_F)}{F(1)} \tag{B.10}$$

Cette dernière relation devant être vérifiée $\forall\eta$, on en déduit une condition de proportionalité entre les termes dépendant de η, laquelle condition est satisfaite lorsqu'on choisit :

$$g(z) = \frac{1}{1+\frac{z^2}{L^2}} \tag{B.11}$$

$$\xi_F = L/2 \tag{B.12}$$

On simplifie alors les termes en η au sein de l'équation, qui devient :

$$\frac{1}{Le^2}\frac{e^{-2ULe\xi_F}/\xi_F}{\left(\int_{\xi_F}^{+\infty} e^{-ULe\xi}\frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}\right)^2} = \frac{F(\theta_F)}{F(1)} \tag{B.13}$$

Si l'on se donne une valeur de Le et une valeur de $P = UL$, un changement de variable dans les intégrales des relations (B.9) et (B.13) conduit à déterminer θ_F d'après :

$$\theta_F = \frac{1}{\sqrt{Le}}e^{\frac{P}{2}(1-Le)}\frac{\int_{P/2}^{+\infty} e^{-t}\frac{dt}{\sqrt{t}}}{\int_{LeP/2}^{+\infty} e^{-t}\frac{dt}{\sqrt{t}}} \tag{B.14}$$

puis, la valeur de $F(\theta_F)$ étant alors connue :

$$U^2 = Le\frac{P}{2}e^{LeP}\left(\int_{LeP/2}^{+\infty} e^{-t}\frac{dt}{\sqrt{t}}\right)^2\frac{F(\theta_F)}{F(1)} \tag{B.15}$$

Finalement, $L = P/U$ achève de donner accès aux courbes de réponse statique.

Celles-ci sont présentées sur la figure suivante pour diverses valeurs de Le.

La valeur du nombre de Lewis pour laquelle U dépasse 1 pour la première fois est définie par :

$$\beta_{eff}\frac{Le-1}{Le} + \frac{2}{Le} = 0 \tag{B.16}$$

qui intervient dans l'étude de stabilité d'une flamme en milieu diffusif [48].

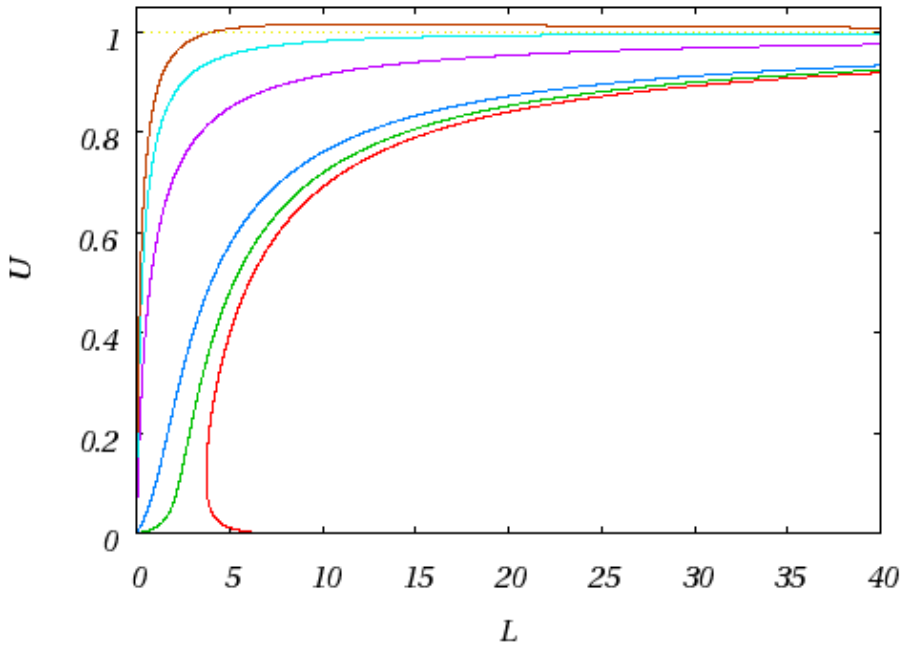


Figure B.1 – Courbes de réponse statique pour diverses valeurs de Le et pour $n = 5$. À U fixé et de droite à gauche : $Le = 100$, 10, 4, 1, 0.7, 0.6. Ici $Le_c \simeq 0,69$. On note qu'il existe une valeur critique du nombre de Lewis $10 < Le < 100$ au delà de laquelle on obtient une courbe de réponse statique du type de celles obtenues pour $Le = +\infty$.

Annexe C

Détails complémentaires sur l'implémentation du modèle MVV

Quelques détails supplémentaires sur l'implémentation du modèle de percolation à vitesse variable (MVV) sont donnés ici, à travers deux diagrammes décrivant qualitativement les grandes étapes de l'algorithme utilisé. La figure C.1 concerne le programme principal, tandis que l'autre (figure C.2) concerne la subroutine de traitement d'une grille.

Un récapitulatif des principales grandeurs du code est également donné ci-dessous.

L_1	largeur de la grille (direction transversale)
L_2	longueur de la grille (direction de propagation)
K	nombre de réalisations pour le calcul des grandeurs statistiques
N	nombre de sites
M	nombre de liens
P	nombre de liens passants ($p = P/M$)
STATUS[s]	tableau des statuts des sites $s \in [1, N]$
BSTATUS[b]	tableau des statuts des liens $b \in [1, M]$
COLLISION[b]	tableau permettant de stocker le sens de propagation effectif le long du lien b, ainsi que l'état de collision sur ce lien (+1 :Gauche→Droite ou Haut→Bas, 0 : collision, -1 :Droite→Gauche ou Bas→Haut)
BONDPROP[b][0 :1]	propriétés du lien b (0 : stockage de la vitesse locale, 1 : stockage du temps de vie restant)
NN[b][0 :1]	tableau donnant les sites reliés entre eux par le lien b (0 :site du haut ou de gauche, 1 : site du bas ou de droite)
SNN[s][0 :7]	tableau donnant les indices des sites voisins du site s (0 à 3) ainsi que les indices des liens vers ces sites (lorsqu'ils existent, sinon -1). Une information supplémentaire sur l'accessibilité de ces sites est codée dans un facteur multiplicatif de l'indice (+1 : accessible, -1 : non accessible).

ORDER[1 :M]	tableau contenant une permutation de l'ensemble des liens $[1, M]$ tirée aléatoirement. Les P premières valeurs sont ensuites interprétées comme les indices des P liens passants sur le réseau.
ACTIVS[1 :M][3]	tableau ordonné (par pointage) servant à stocker les liens actifs (en train de brûler). La première ligne donne l'indice du lien, la seconde donne la position dans ACTIVS du lien devant brûler juste avant, la troisième donne la position dans ACTIVS du lien devant brûler juste après. En première colonne sont stockées la position au sein d'ACTIVS du lien devant finir de brûler en premier, ainsi que la position du dernier élément.
FRONTUP[1 :$L_1 + 1$]	tableau dans lequel est stockée la position du front d'invasion suivant chacune des $L_1 + 1$ lignes de la grille.
FREE	statut des sites et liens avant combustion
BURNT	statut des sites et liens brûlés ou en train de brûler.
sold	indice du site à partir duquel le lien courant a été contaminé par la flamme.
snew	indice du site sur lequel débouche la flamme achevant de brûler le lien courant.

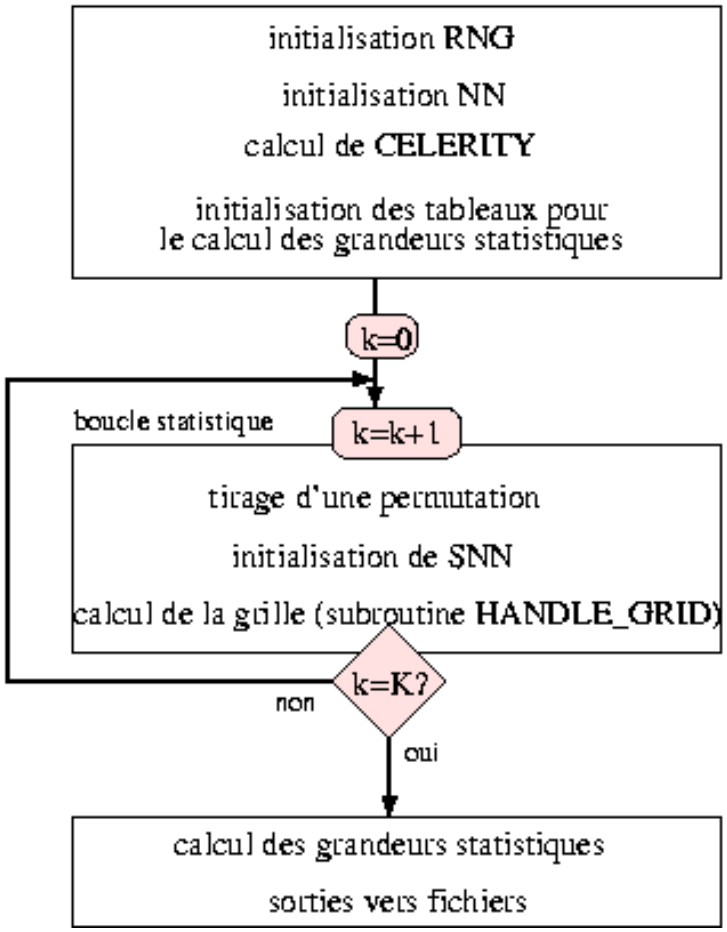


Figure C.1 – Détails sur l'algorithme du programme principal main().

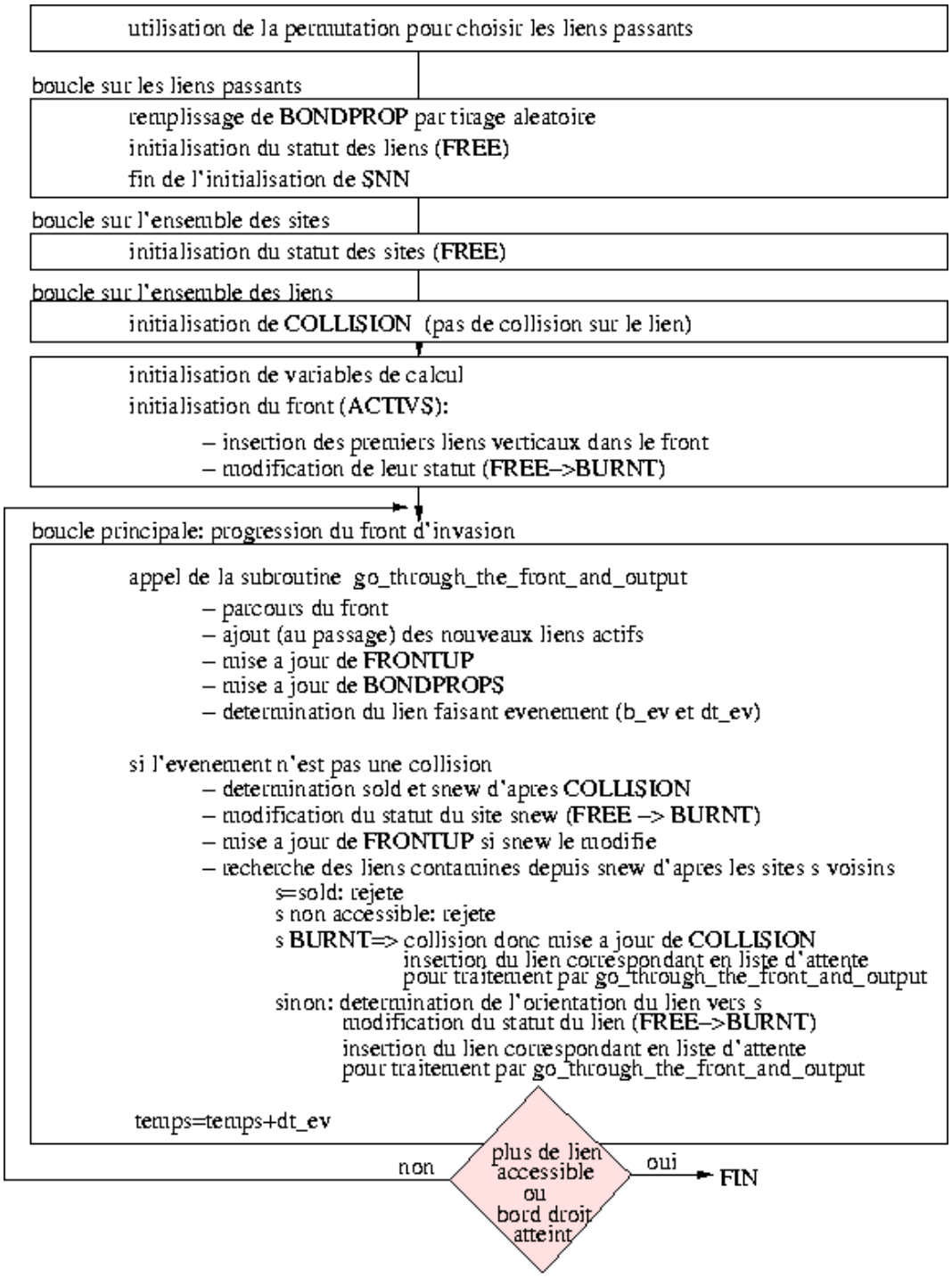


Figure C.2 – Détail sur l'algorithme de la subroutine HANDLE_GRID().

Bibliographie

[1] Abdusalam (H.A.), *Percolation on Inhomogeneous Bethe Lattice and Forest Fire Models*, Int. J. Theor. Phys., vol. **37**, pages 1587-1592, 1998.

[2] Albinet (G.), Searby (G.) et Stauffer (D.), *Fire propagation in a 2-D random medium*, Journal de Physique, vol. **47**, pages 1-7, 1986.

[3] Barabási (A.-L.) et Stanley (H.E.), *Fractal Concepts in Surface Growth*, Cambridge University Press (Cambridge), 1995.

[4] Bergé (P.), Pomeau (Y.) et Vidal (Ch.), *L'ordre dans le chaos*, Hermann (Paris), 1998.

[5] Broadbent (S.R.) et Hammersley (J.M.), *Percolation processes I. Cristals and mazes*, Proc. Camb. Phil. Soc., vol. **53**, pages 629-641, 1957.

[6] Boyd (J.P.), *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*, Dover Publications (New York), 2000.

[7] Buckmaster (J.D.) et Ludford (G.S.S.), *Theory of laminar flames*, Cambridge University Press, 1982.

[8] Canuto (C.), Hussaini (M.Y.), Quarteroni (A.) et Zang (T.A.), *Spectral Methods in Fluid Dynamics*, Springer-Verlag, 1988.

[9] De Gennes (P.G.), *La percolation : un concept unificateur*, La Recherche, vol. **72**, pages 919-927, 1976.

[10] Denet (B.), *Simulations numériques d'instabilités de fronts de flamme*, Thèse de doctorat, Université de Provence, France, 1988.

[11] Favier (C.), *Percolation model of fire dynamic*, Phys. Lett. A, vol. **330**, pages 396-401, 2004.

[12] Feders (J.), *Fractals*, Plenum Press, New-York, 1988.

[13] Flory (P.J.), *Molecular size distribution in three-dimensional gelation I-III*, J. Am. Chem. Soc., vol. **63**, pages 3083-3100, 1941.

[14] Fendell (F.E.), *Asymptotic analysis of premixed burning with large activation energy*, J. Fluid. Mech., vol. **56**, pages 81-95, 1972.

[15] Frigo (M.) et Steven (G.J.), *The Design and Implementation of FFTW3*, Proceedings of the IEEE, vol. **93**, pages 216-231, 2005.

[16] Galam (S.) et Mauger (A.), *On reducing terrorism power : a hint from physics*, Physica A, vol. **323**, pages 695-704, 2003.

[17] Grimmett (G.), *Percolation*, Springer-Verlag (Berlin), 1989.

[18] Gropp (W.), Lusk (E.) et Skjellum (A.), *Using MPI, 2nd Edition*, MIT Press, 1999.

[19] Horway (G.) et Cahn (J.W.), *Dendritic and spheroïdal growth*, Acta Metallurgica, **9**, pages 695-705, 1961.

[20] Hoshen (J.) et Kopelman (R.), *Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm*, Phys. Rev. B, **14**, pages 3438-3445, 1976.

[21] Hundsdorfer (W.) et Verwer J., *Numerical Solution of Time-Dependent Advection-Diffusion-Reaction Equations*, Springer (Berlin), 2003.

[22] Isichenko (M.B.), *Percolation, statistical topography and transport in random porous media*, Rev. Mod. Phys., **64**, pages 961-1043, 1992.

[23] Joulin (G.) et Vidal (P.), *An introduction to the instability of flames, shocks, and detonations*, in *Hydrodynamics and Nonlinear Instabilities*, Cambridge University Press, 1998.

[24] Joulin (G.), *communication privée.*

[25] Kazakov (K.A.), *On-shell description of stationary flames*, Phys. Fluids, **17**, 032107, 2005.

[26] Kershtein (A.R.) et Law (C.K.), *Percolation in combusting sprays I : Transition from cluster combustion to percolate combustion in non-premixed sprays*, Proc. Combust. Inst., vol. **19**, pages 961-969, 1982.

[27] King (P.R.), Buldyrev (S.V.), Dokholyan (N.V.), Havlin (S.), Lee (Y.), Paul (G.), Stanley (H.E.) et Vandesteeg (N.), *Predicting oil recovery using percolation theory*, Petroleum Geoscience, **7**, pages S105-S107, 2001.

[28] Krug (J.) et Spohn (H.), *Kinetic roughening of growing surfaces*, in Solids Far From Equilibrium, Cambridge University Press (Cambridge), 1991.

[29] Kurdyumov (V.N.), Linan (A.) et Fernandez (E.), *Flame flashback and propagation of premixed flames near a wall*, Proc. Comb. Inst., vol. **28**, pages 1883-1889, 2000.

[30] Matkowski (B.J.) et Sivashinsky (G.I.), *An asymptotic derivation of two models in flame theory associated with the constant density approximation*, SIAM J. Appl. Math., vol.**37**, pages 686-699, 1979.

[31] Maunuksela (J.), Kähkönen (O.-P.), Timonen (J.), Provatas (N.), Alava (M.J.) et Ala-Nissila (T.), *Kinetic Roughening in Slow Combustion of Paper*, Phys. Rev. Letters **79**, pages 1515-1518, 1997.

[32] Morton (K.W.), *Numerical Solution of Convection-Diffusion Problems*, Chapman and Hall, London, 1996.

[33] Newman (M.E.J.) et Ziff (R.M.), *Fast Monte Carlo algorithm for site or bond percolation*, Phys. Rev. E, vol. **64**, 016706, 2001.

[34] Niessen (W.) et Blumen (A.), *Dynamics of forest fires as a directed percolation model*, J. Phys.A., vol. **19**, pages L289-L293, 1986.

[35] Olson (K.), *PARAMESH : A Parallel Adaptive Grid Tool*, in Parallel Computational Fluid Dynamics 2005 : Theory and Applications : Proceedings of the Parallel CFD Conference, College Park, MD, U.S.A., eds. A. Deane, A. Ecer, G. Brenner, D. Emerson, J. McDonough, J. Periaux, N. Satofuka, and D. Tromeur-Dervout (Elsevier), 2006.

[36] Pajot (S.), *Percolation et économie*, Thèse de doctorat, Université de Nantes, France, 2001.

[37] Provatas (N.), Ala-Nissila (T.), Grant (M.), Elder (K.R.) et Piché (L.), *Flame propagation in random media*, Phys. Rev. E, vol. **51**, 4232, 1995.

[38] Provatas (N.), Ala-Nissila (T.), Grant (M.), Elder (K.R.) et Piché (L.), *Scaling, Propagation, and Kinetic Roughening of Flame Fronts in Random Media*, J. Stat. Phys, vol. **81**, 1995.

[39] Rabinovich (O.S.) et Grinchuk (P.S.), *Percolation effets during heterogeneous mixtures burning with random distribution of fuel*, Proceedings of Int. Conf. on Comb. and Det., Moscow, 2004.

[40] Schawartz (N.), Cohen (R.), Ben-Avraham (D.), Barabási (A.-L.) et Havlin (S.), *Percolation in Directed Scale-Free Networks*, Phys. Rev. E, vol. **66**, 015104, 2002.

[41] Sen (P.), *Non-Uniqueness of Spanning Clusters in Two to Five Dimensions*, Int. Journ. of Mod. Phys. C, vol. **7**, pages 603-607, 1996.

[42] Shklovskii (B.I.) et Efros (A.L.), *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer Verlag (Heidelberg), 1984.

[43] Stauffer (D.) et Aharony (A.), *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis (London), 1998.

[44] Téphany (H.), Nahmias (J.) et Duarte (J.), *Combustion on heterogeneous media. A critical phenomenon*, Phys. A, vol. **242**, pages 57-69, 1997.

[45] Téphany (H.), *Modèles expérimentaux de combustion sur milieux hétérogènes aléatoires*, Thèse de doctorat, Université de Poitiers, France, 1997.

[46] Umemura (A.) et Takamori (S.), *Percolation theory for flame propagation in non- or less-volatile fuel spray : A conceptual analysis to group combustion excitation mechanism*, Comb. Flame **141**, pages 336-349, 2005.

[47] Vervisch (L.) et Poinsot (T.), *Direct numerical simulation of non-premixed turbulent combustion*, Annu. Rev. Fluid Mech., vol. **30**, pages 655-692, 1998.

[48] Williams (F.A.), *Combustion theory*, Benjamin Cummings, Menlo Park, 1985.

Résumé

La propagation d'une flamme dans un milieu réactif désordonné met en jeu des disparités d'échelles de longueur si importantes que l'étude en est inaccessible sans un effort important de modélisation.

Cette thèse s'appuie sur le fait qu'un tel cadre est propice à l'emploi du concept de percolation, par le biais duquel on modélise les amas que forment les régions inflammables du milieu. On se restreint à la combustion d'un réactif solide, et à une forme de désordre telle que le milieu présente des chemins (ou canaux) privilégiés pour la propagation d'une flamme.

Des modèles théoriques pour l'étude d'une flamme initiée au sein d'un canal unique sont d'abord considérés. Ils mettent à jour une extinction lorsque le canal est trop étroit et fournissent des relations entre célérité de flamme et largeur du canal. Leurs conclusions sont validées par similations numériques directes. Ces résultats sont alors utilisés pour établir et exploiter un modèle dérivé de la percolation de lien, étudié d'un point de vue dynamique pour caractériser la propagation à grande échelle d'une flamme dans le milieu. Diverses lois d'échelle sont ainsi mises en évidence.

Mots-clés: Percolation, modélisation, simulation numérique, instabilités, perturbation (mathématiques).

Abstract

The propagation of a flame in a disordered reactive medium brings into play so important disparities of length scales that its study remains inaccessible without a great effort of modeling. The analysis presented here relies on the use of percolation concepts by considering the combustion field as a collection of percolation clusters. Specifically, we focus on the combustion of disordered solid fuels for which flames only propagate along a network of preferential paths (or channels) distributed over the medium. Theoretical models are first introduced to study flame propagation through a single channel. They show the existence of flame quenching for too narrow channels and provide a relationship between the latters' width and the curved-flame speed. Good agreements are found with direct numerical simulations. The results so obtained are then used to develop a dynamical model based on bond percolation to characterize flame propagation through disordered reactive media. Various scaling laws are finally obtained.

Keywords: Percolation, modelling, numerical simulation, instabilities, perturbation (mathematics).