

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC

MÉMOIRE  
PRÉSENTÉ À  
L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À CHICOUTIMI  
COMME EXIGENCE PARTIELLE  
DE LA MAÎTRISE EN INGÉNIERIE

PAR  
AMAL BOUAMOUL

**MODÉLISATION MATHÉMATIQUE D'UNE FLAMME DE  
DIFFUSION MÉTHANE-AIR AVEC VICIATION ET EN  
CONFIGURATION CONTRE COURANT**

JUIN 1999



### **Mise en garde/Advice**

Afin de rendre accessible au plus grand nombre le résultat des travaux de recherche menés par ses étudiants gradués et dans l'esprit des règles qui régissent le dépôt et la diffusion des mémoires et thèses produits dans cette Institution, **l'Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** est fière de rendre accessible une version complète et gratuite de cette œuvre.

Motivated by a desire to make the results of its graduate students' research accessible to all, and in accordance with the rules governing the acceptance and diffusion of dissertations and theses in this Institution, the **Université du Québec à Chicoutimi (UQAC)** is proud to make a complete version of this work available at no cost to the reader.

L'auteur conserve néanmoins la propriété du droit d'auteur qui protège ce mémoire ou cette thèse. Ni le mémoire ou la thèse ni des extraits substantiels de ceux-ci ne peuvent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

The author retains ownership of the copyright of this dissertation or thesis. Neither the dissertation or thesis, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

*Je dédie ce mémoire, à mes chers parents,  
à mon mari Pascal, à Hicham et à Sana.*

## **Résumé**

*Le but de notre travail est d'apporter une contribution à l'analyse de la structure des flammes laminaires étirées de diffusion. En effet, ces flammes laminaires étirées jouent un rôle important dans la modélisation des flammes turbulentes utilisant le concept de flammelette. Le modèle de la flamme cohérente considère la combustion turbulente comme l'assemblage de flammelettes laminaires étirées, emportées et déformées par la turbulence. L'étude des flammelettes laminaires permet de valider les mécanismes chimiques, de dégager les réactions prépondérantes de la combustion, de connaître la structure fine du front de flamme et de connaître pour une pression et une température de gaz frais donnée les fractions massiques de toutes les espèces chimiques.*

*Ce travail se divise en deux grandes parties. La première est consacrée à la modélisation et au traitement numérique des flammes laminaires étirées de diffusion. On y trouvera une description des équations de bilan, les expressions des propriétés de transport et des variables thermodynamiques, les notions de réactions chimiques et de mécanismes cinétiques, les équations de bilan des flammes laminaires étirées, la formulation à étirement constant, les conditions aux limites, la méthode Newton et le couplage de cette méthode avec un maillage adaptatif.*

*La seconde partie est consacrée à l'étude numérique de la flamme laminaire étirée de diffusion méthane air. On y trouve deux calculs pour deux schémas cinétiques différents. Le premier mécanisme réactionnel contient 27 espèces et 100 réactions. L'étude porte sur l'influence de l'augmentation de la température des gaz frais sur la structure du front de flamme. Le deuxième schéma réactionnel contient 38 espèces et 162 réactions. La différence entre ce schéma et le premier, c'est que le deuxième tient compte des oxydes d'azote. On y trouve dans la seconde partie l'étude de l'influence de l'augmentation de la température des gaz frais et de la viciation de l'air par des produits de combustion sur la formation des oxydes d'azote.*

*À la fin de la dernière partie de ce mémoire on trouve les graphes, les figures ainsi que les références.*

## **Remerciements**

*Je suis très heureuse que le Professeur André CHARETTE ait accepté de diriger mon mémoire. Je lui exprime ma profonde gratitude pour son encadrement et son soutien efficace.*

*Je tiens à remercier Monsieur Mohamed Hacin SENNOUN d'avoir accepté de co-diriger ce travail. Je le remercie pour son appui et ces conseils.*

*Je voudrais remercier le Professeur Rung Tien BUI pour son soutien à ce travail.*

*Je remercie également tous les membres du Groupe de Recherche en Ingénierie des Procédés et Systèmes (GRIPS) pour l'ambiance de travail.*

*Ce travail a été rendu possible par la participation financière de l'Université du Québec à Chicoutimi et le Programme Aide Institutionnelle à la recherche (PAIR).*

*Finalement, je tiens à remercier sincèrement mon mari pour son support dans les moments difficiles et pour son encouragement.*

## **TABLE DES MATIÈRES**

Résumé.....	<i>iii</i>
Remerciements.....	<i>iv</i>
Liste des figures et des tableaux.....	<i>vii</i>
Liste des graphes.....	<i>ix</i>
Nomenclature.....	<i>xiii</i>
<b>Introduction.....</b>	<b>1</b>
<b>1. Équations des mélanges réactifs gazeux.....</b>	<b>8</b>
1.1 Paramètres d'étude.....	8
1.1.1 La richesse.....	10
1.1.2 L'étirement.....	12
1.2 Équations de bilan.....	14
1.3 Variables thermodynamiques.....	17
1.4 Cinétique chimique.....	21
1.5 Phénomènes de transport.....	25
1.6 Flux thermique.....	27
1.7 Propriétés de transport.....	28
1.8 Conclusion.....	32
<b>2. Modélisation des flammes laminares.....</b>	<b>33</b>
2.1 Approximations pour les flammes laminares.....	33
2.2 Approximations du faible nombre de Mach.....	34
2.3 Équations des flammes isobares.....	35

2.4	Flammes laminaires étirées de diffusion.....	39
2.4.1	Formulation à étirement constant.....	39
2.4.2	Les conditions aux limites.....	41
2.5	Étude numérique d'une flamme laminaire étirée.....	42
2.5.1	Discrétisation.....	43
2.5.2	La méthode de Newton.....	46
2.5.3	Remaillage du domaine de calcul.....	47
2.5.4	Aperçu sur le calcul.....	49
2.6	Conclusion.....	50
<b>3.</b>	<b>Résultats numériques.....</b>	<b>51</b>
3.1	Mécanismes de référence.....	51
3.2	Paramètre d'études de la flamme.....	52
3.3	Résultats numériques.....	54
3.3.1	Schéma sans oxyde d'azote.....	54
3.3.1.1	Influence de l'étirement.....	57
3.3.1.2	Influence de la température d'injection de l'air.....	57
3.3.2	Schéma avec oxydes d'azote.....	61
3.3.2.1	Influence de la température d'injection de l'air.....	64
3.3.2.2	Influence de la viciation.....	66
3.4	Conclusion.....	69
<b>4.</b>	<b>Conclusion.....</b>	<b>71</b>
	<b>Annexe 1.....</b>	<b>74</b>
	<b>Annexe 2.....</b>	<b>79</b>
	<b>Annexe 3.....</b>	<b>83</b>
	<b>Références.....</b>	<b>89</b>

## **Liste des figures et des tableaux**

Tableau 3.1	La température maximale de fin de combustion et la position $L_M$ pour différentes températures d'injection d'air .....59
Tableau 3.2	La vitesse du front de flamme, la vitesse d'expansion des gaz frais et la position $L_F$ pour différentes températures d'injection d'air .....60
Tableau 3.3	Comparaison entre les fractions massiques maximales de quelques espèces chimiques pour les deux schémas cinétiques.....63
Tableau 3.4	L'erreur de calcul sur les fractions massiques maximales.....64
Tableau 3.5	La fraction massique de quelques espèces chimiques présentées pour deux températures.....65
Tableau 3.6	La température maximale et la vitesse d'expansion pour différents cas de viciation.....67
Tableau 3.7	La fraction massique maximale de $NO$ et $NO_2$ pour différents cas de viciation.....69
Figure 1	Modèle de la flamme cohérente.
Figure 2	Flamme de prémélange (configuration double flamme).
Figure 3	Flamme de prémélange (configuration simple flamme).



- Figure 4      Flamme de diffusion.
- Figure 5      Flamme de diffusion (flamme viciée par des produits de combustion).
- Figure 6      Un dispositif expérimental pour la réalisation d'une flammelette
- Figure 7      Interaction du modèle de la flammelette et du modèle de combustion global.
- Figure 8      La configuration étudiée
- Figure 9      La position de la vitesse d'expansion des gaz frais  $V_E$  et du front de flamme  $V_F$ .
- Figure 10     Zones de recirculation et de viciation par des produits de combustion.

## Liste des graphes

- Figure (3.1a) Le profil de température ( $T_{air}= 283.K$ ,  $T_{fuel}= 332.K$  et  $\varepsilon = 100 s^{-1}$ ).
- Figure (3.1b) Le profil de vitesse axiale ( $T_{air}= 283.K$ ,  $T_{fuel}= 332.K$  et  $\varepsilon = 100 s^{-1}$ ).
- Figure (3.1c) Le profil des fractions massiques des espèces majoritaires ( $T_{air}= 283.K$ ,  $T_{fuel}= 332.K$  et  $\varepsilon = 100 s^{-1}$ ).
- Figure (3.1d) Le profil des fractions massiques des espèces majoritaires en échelle logarithmique ( $T_{air}= 283.K$ ,  $T_{fuel}= 332.K$  et  $\varepsilon = 100 s^{-1}$ ).
- Figure (3.1e) Le profil des fractions massiques des espèces minoritaires ( $T_{air}= 283.K$ ,  $T_{fuel}= 332.K$  et  $\varepsilon = 100 s^{-1}$ ).
- Figure (3.1f) Le profil des fractions massiques des espèces  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ ,  $CH_4$ .
- Figure (3.1g) La comparaison entre la présente modélisation et celle de Dixon-Lewis pour la température et la vitesse axiale.
- Figure (3.1h) La comparaison entre la présente modélisation et celle de Dixon-Lewis pour les espèces majoritaires et minoritaires.
- Figure (3.1.2a) Le profil de température de fin de combustion pour différentes températures d'injection d'air.
- Figure (3.1.2b) Le profil de vitesse axiale pour différentes températures d'injection d'air.
- Figure (3.1.2c) La fraction massique de  $CO_2$  pour différentes températures d'injection d'air.
- Figure (3.1.2d) La fraction massique de  $H_2O$  pour différentes températures d'injection d'air.
- Figure (3.1.2e) La fraction massique de  $CO$  pour différentes températures d'injection d'air.

Figure (3.1.2f) La fraction massique de  $H_2$  pour différentes températures d'injection d'air.

Figure (3.1.2g) La fraction massique de  $O_2$  pour différentes températures d'injection d'air.

### **Les figures du deuxième schéma réactionnel**

Figure (3.2a) Comparaison des profils de température pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2b) Comparaison des profils de vitesse pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2c) Comparaison des fractions massiques de  $CO_2$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2d) Comparaison des fractions massiques de  $H_2O$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2e) Comparaison des fractions massiques de  $O_2$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2f) Comparaison des fractions massiques de  $CH_4$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2g) Comparaison des fractions massiques de  $NO$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2h) Comparaison des fractions massiques de  $NO_2$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2i) Comparaison des fractions massiques de  $N_2O$  pour les deux schémas cinétiques.

Figure (3.2j) Comparaison des fractions massiques de  $CO$  pour les deux schémas cinétiques.

- Figure (3.2k) Comparaison des fractions massiques de  $OH$  pour les deux schémas cinétiques.
- Figure (3.2l) Comparaison des fractions massiques de  $H_2$  pour les deux schémas cinétiques.
- Figure (3.2m) Comparaison des fractions massiques de  $CH$  pour les deux schémas cinétiques.
- Figure (3.2n) Comparaison des fractions massiques de  $CH_2O$  pour les deux schémas cinétiques.
- Figure (3.2o) Comparaison des fractions massiques de  $CH_2$  pour les deux schémas cinétiques.
- Figure (3.2.1a) La fraction massique de  $N$ .
- Figure (3.2.1b) La fraction massique de  $NO$ .
- Figure (3.2.1c) La fraction massique de  $NO_2$ .
- Figure (3.2.1d) La fraction massique de  $N_2O$ .
- Figure (3.2.2a) Le profil de température de fin de combustion pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.
- Figure (3.2.2b) Le profil de vitesse axiale pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.
- Figure (3.2.2c) La fraction massique de  $CO_2$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.
- Figure (3.2.2d) La fraction massique de  $CO$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.
- Figure (3.2.2e) La fraction massique de  $OH$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.
- Figure (3.2.2f) La fraction massique de  $NO$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

Figure (3.2.2g) La fraction massique de  $NO_2$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

Figure (3.2.2h) La fraction massique de  $N_2O$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

## Nomenclature

$C$	concentration molaire globale	$\text{mol/m}^3$
$C_{P_j}$	chaleur molaire à pression constante de l'espèce $j$	$\text{J/mol.K}$
$C_j$	concentration molaire de l'espèce $j$	$\text{mol/m}^3$
$c_P$	chaleur massique à pression constante	$\text{J/kg.K}$
$c_{P_j}$	chaleur massique à pression constante de l'espèce $j$	$\text{J/kg.K}$
$c_v$	chaleur massique à volume constant	$\text{J/kg.K}$
$D$	diamètre du brûleur	$\text{m}$
$D_j^H$	coefficient de diffusion binaire de la $j^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{jk}$	coefficient de diffusion binaire	$\text{m}^2/\text{s}$
$D_{T,j}$	facteur de diffusion thermique de la $j^{\text{ème}}$ espèce dans le mélange	
$D_{T,jk}$	facteur de diffusion thermique binaire	
$E_i$	énergie d'activation	$\text{J/mol}$
$e$	énergie interne massique	$\text{J/kg}$
$f_j$	force massique extérieure de l'espèce $j$	$\text{N/kg}$
$g$	vitesse relative	$\text{m/s}$
$H$	distance entre les deux brûleurs	$\text{m}$
$H$	enthalpie molaire du mélange	$\text{J}$
$H_j$	enthalpie molaire de l'espèce $j$	$\text{J/mol}$
$h$	enthalpie massique du mélange	$\text{J/kg}$
$h_j$	enthalpie massique de l'espèce $j$	$\text{J/kg}$
$I$	matrice unité.	
$J$	matrice jacobienne	
$K$	nombre de réaction	

$k_B$	constante de <i>Boltzmann</i>	
$k_d$	constante de réaction directe	
$k_r$	constante de réaction inverse	
$k_e$	constante de réaction d'équilibre	
$L$	nombre de composantes dans le mélange	
$L_E$	position du front de flamme	m
$M_{jk}$	masse réduite du couple $(j,k)$	kg/mol
$M$	masse molaire du mélange	kg/mol
$M_a$	masse molaire du comburant	kg/mol
$M_f$	masse molaire du combustible	kg/mol
$M_j$	masse molaire de l'espèce $j$	kg/mol
$m$	masse totale	kg
$m_j$	masse de l'espèce $j$	kg
$\dot{m}_f$	débit massique du combustible	m <sup>2</sup> /s
$\dot{m}_a$	débit massique du comburant	m <sup>2</sup> /s
$m_{ji}^0$	masse initiale de $j$ dans la réaction $i$	kg
$m_{ji}$	masse de $j$ dans la réaction $i$	kg
$N$	nombre d'espèces chimiques dans l'écoulement	
$n_j$	nombre de moles de l'espèce $j$	mol
$n$	nombre de moles totale	mol
$\bar{P}$	tenseur des pressions	Pa
$p$	pression	Pa
$p_u$	pression spatialement uniforme	Pa
$\tilde{p}$	perturbation de la pression	Pa
$p_{atm}$	pression atmosphérique	Pa
$q$	flux de chaleur	W/m <sup>2</sup>
$q_r$	flux de chaleur dû au rayonnement	W/m <sup>2</sup>
$R$	constante universelle des gaz parfaits	J/mol.K

$T$	température	K
$T_i$	température d'activation de la $i^{ème}$ réaction	K
$T_o$	température de référence	K
$S_j$	entropie molaire de l'espèce $j$	J/K.mol
$s_j$	entropie massique de l'espèce $j$	J/K.kg
$s$	entropie massique totale	J/K.kg
$U$	vitesse adimensionnée	
$u$	vecteur de vitesse de diffusion	m/s
$u$	vitesse suivant l'axe des $x$	m/s
$V$	vitesse suivant l'axe des $y$	m/s
$V_T$	vitesse d'injection des gaz frais	m/s
$V_0$	vitesse de diffusion de l'espèce $j$	m/s
$V_{D_j}$	vitesse d'expansion des gaz frais	m/s
$V_E$	vitesse du front de flamme	m/s
$V_F$	vitesse de correction	m/s
$v_c$	vecteur de vitesse ordinaire	m/s
$v_j$	taux de production massique de l'espèce $j$	kg/s.m <sup>3</sup>
$\dot{W}_j$	taux de production massique de l'espèce $j$ dans la réaction $i$	kg/s.m <sup>3</sup>
$\dot{W}_{ji}$	vecteur de diffusion thermique	m/s
$w_j$	fraction molaire de l'espèce $j$	
$X_j$	fraction massique de l'espèce $j$	
$Y_j$	fonction inconnue	
$Z$		

### Symboles grecs

$\alpha_s$	richesse stœchiométrique
$\gamma'_{ji}, \gamma''_{ji}$	coefficients stœchiométriques de l'espèce $j$ dans la réaction $i$



$\varepsilon$	étirement	$s^{-1}$
$\varepsilon_e$	étirement expérimental	$s^{-1}$
$\varsigma$	flux massique ( $V \cdot \rho$ )	$kg/m^2s$
$\lambda$	paramètre de relaxation	
$\lambda$	conductivité thermique du mélange	$W/m.K$
$\lambda_j$	conductivité thermique de l'espèce $j$	$W/m.K$
$\nu$	coefficient de viscosité cinématique du mélange	$m^2/s$
$\nu_j$	coefficient de viscosité cinématique de l'espèce $j$	$m^2/s$
$\xi$	nœuds du maillage	
$\xi_i$	degré d'avancement de la réaction $i$	
$\Pi$	tenseur des contraintes de viscosité	$m^2/s^2$
$\rho$	masse volumique totale	$kg/m^3$
$\rho_j$	masse volumique de l'espèce $j$	$kg/m^3$
$\sigma_j$	diamètre de collision du potentiel d'interaction de <i>Lennard-Janes</i>	$m$
$\sigma_{jk}$	diamètre du couple d'espèce $(j,k)$	$m$
$\Phi$	richesse du mélange	
$\chi$	angle de déviation des deux molécules $j$ et $k$ après la collision	
$\Omega^{(s,l)*}$	intégrale réduite de collision	
$\Im$	domaine du maillage	
$\aleph$	constante de calcul	

### Exposants, indices, symboles particuliers

$y$	position axiale
$x$	position radiale
$\nabla$	opérateur de dérivation d'espace
$+\infty$	conditions aux limites du côté du brûleur d'air.

$-\infty$	conditions aux limites du coté du brûleur du méthane.
$( : )$	produit tensoriel
$med$	valeur moyenne
$inf$	valeur inférieure
$sup$	valeur supérieure
$A_j$	symbole chimique de l'espèce $j$
$a_{ji}$	des constantes de calcul
$i$	symbole de la réaction chimique
$j$	symbole de l'espèce chimique.
$\frac{\partial}{\partial t}$	dérivation par rapport au temps
$\frac{\partial}{\partial y}$	dérivation par rapport à l'espace.

# INTRODUCTION

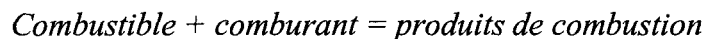
## **Problématique :**

L'étude des phénomènes de combustion présente un intérêt considérable dans de nombreux secteurs industriels. L'amélioration du rendement des fours industriels, des moteurs à combustion interne et des réacteurs d'avion, nécessite le développement de nouvelles méthodes de calcul ainsi que la compréhension des mécanismes de base qui régissent un phénomène aussi complexe que la combustion. Le souci majeur de toutes les industries est d'arriver à une combustion efficace, économique et écologique. Seules des études détaillées de la structure de flamme permettent d'atteindre ces objectifs. Le caractère hybride "aéro – thermo – chimique" de la flamme fait intervenir des problèmes liés aux transferts de matière, d'énergie et de quantité de mouvement, d'où la nécessité de développer de nouvelles méthodes de calcul capables de tenir compte de toutes les interactions présentes dans un écoulement turbulent. Ce genre de calcul est rendu possible grâce à l'apparition des ordinateurs et la progression de leur puissance.

La simulation directe d'un écoulement turbulent n'est actuellement possible que pour des cas très simples pour lesquels la géométrie est idéale et où le nombre de *Reynolds* est faible. Ce qui n'est pas le cas dans les chambres de combustion où le nombre de *Reynolds* est très important. L'approche théorique de la combustion a été bouleversée ces dernières années

par le développement de modèles capables de trouver une solution approchée à tous ces problèmes.

Parmi ces modèles, on trouve les modèles classiques. Dans ces modèles, la cinétique chimique est simple. Elle est remplacée par une seule réaction :



Ce modèle est avantageux car il est simple d'utilisation et donne de bons résultats qualitatifs. Cependant, il utilise une chimie très simplifiée, des coefficients de transport constants. Par conséquent, il donne de mauvais résultats quantitatifs. En effet, la cinétique chimique présente dans l'écoulement est trop complexe pour être représentée par une seule réaction, les coefficients de transfert et de thermodynamique sont variables et il existe une forte interaction entre la chimie et la turbulence.

Après les modèles classiques, il y a eu d'autres modèles comme celui d'*Arrhénius* et ceux utilisant des diagrammes de *Clapeyron* (réf. 47).

Le modèle utilisé dans cette étude est celui de *Marble* et *Broadwell* (réf.34). Ce modèle suppose que la flamme produite dans la zone de mélange est constituée d'un ensemble d'éléments de flammes laminaires élémentaires identifiables dont les épaisseurs sont faibles par rapport à celles des structures turbulentes. La structure de chaque élément de flamme conserve son identité tout en étant convectée et emportée par l'écoulement turbulent. Ces flammes subissent des rotations, des déformations et des étirements. Les expériences de *Brown* et *Roshko* (réf.5) ont permis de valider l'existence de ces structures cohérentes.

Le modèle des flammelettes est schématisé à la figure (1). Dans cette figure, deux jets de combustible et de comburant attaquent la zone de réaction en donnant naissance à une

flamme turbulente. Un élément de flamme est localisé à l'instant  $t_0$  et gardera son identité tout en étant emporté par l'écoulement turbulent (instant  $t$ ).

Bien que la plupart des foyers de combustion industriels soient turbulents, l'étude des flammes laminaires présente un intérêt considérable. En effet, les modèles de type flammelettes permettent le couplage entre la cinétique chimique et la turbulence. Ce genre de calcul est validé lorsque la longueur caractéristique de la turbulence est plus importante que l'épaisseur caractéristique du front de flamme.

Plusieurs auteurs ont écrit sur le rôle des flammes laminaires dans la modélisation de la combustion turbulente. L'intérêt fut partagé par de nombreux chercheurs, dont voici une liste : *Clavin et al (1982)*, *Libby et al (1982) (1984)*, *Bray et al (1984)*, *Liew et al (1984)*, *Clavin (1985)*, *Bray (1986)* et *Peters (1986)*.

Les méthodes d'investigation non expérimentales des flammes laminaires, c'est-à-dire la résolution d'équations de bilan se divise en trois groupes : les méthodes mathématiques, les méthodes asymptotiques et les méthodes numériques.

Les méthodes mathématiques se proposent de démontrer l'existence et l'unicité d'une solution ou encore de justifier un résultat obtenu par une méthode asymptotique.

Les méthodes asymptotiques utilisent des développements d'équations en série. Ces techniques conduisent à des résultats simples et analytiques. Toutefois, elles ne s'appliquent qu'à des problèmes dont la formulation n'est pas complexe.

Les méthodes numériques sont indispensables à l'étude des flammes laminaires. Les équations qui régissent les flammes laminaires sont tout d'abord discrétisées à l'aide d'une méthode numérique. La solution finale est obtenue par la suite, de manière itérative en

utilisant une méthode récursive et en réadaptant le maillage à chacune des itérations. Cette méthode a l'avantage de résoudre exactement des problèmes complexes. Par contre, l'analyse des résultats obtenus n'est pas toujours aisée. C'est cette méthode qui sera utilisée dans ce mémoire.

L'étude des flammes nécessite la compréhension et la distinction de trois types de combustion : la combustion en volume, la combustion en prémélange et la combustion en diffusion. Pour la combustion en "volume", le milieu réactif est spatialement homogène. La combustion en prémélange peut être réalisée en dirigeant un jet de mélange combustible et comburant contre un autre jet identique (*fig.2*) ou contre des produits de combustion (*fig.3*). La zone de réaction donnera une ou deux flammes suivant le cas. Enfin, la combustion de diffusion est obtenue en dirigeant un jet de combustible contre un jet de comburant (*fig.4*) ou contre de l'air vicié par des produits de combustion (*fig.5*). La zone de rencontre donne lieu à une flamme de diffusion. Ce genre de configuration est réalisé expérimentalement en disposant deux brûleurs opposés (*fig.6*).

### **Objectif de ce mémoire :**

L'objectif de cette étude est d'apporter une contribution à l'analyse des flammes laminaires de diffusion à contre courant et à point d'arrêt. Le point d'arrêt dans un profil de vitesse réfère à la position où la vitesse axiale est nulle. Ce genre de flamme a fait l'objet d'un grand nombre d'études aussi bien asymptotiques que numériques et expérimentales. Pour les flammes de diffusion, on se réfère aux études de *Fendell (1965)*, *Tsuji et Yamaoka (1967)*, *Linan (1974)*, *Tsuji (1982)*, *Peters et al (1987)*, *Rolon et al (1987)*, *Axelbaum et al*

(1988), Dixon-Lewis et al (1988), Rogg (1988), Seshadri et Peters (1988), Rolon et al (1989) et Darabiha (1992).

Alors que pour les flammes de prémélange on trouve Zeldovitch (1938), Fendell (1972), Ishizuka et Law (1982), Bruckmaster (1982), Clavin et al (1982), Libby et Williams (1982), (1983), (1984), Clavin (1985), Giovangigli et al (1986), Thien et Matalon (1991) et Sennoun (1994).

**Les deux aspects fondamentaux de l'étude des flammes laminaires qui sont développés dans ce mémoire sont la détermination des limites d'extinction, l'influence de la viciation de l'air par des produits de combustion sur la formation des oxydes d'azote et l'influence de l'augmentation de la température de l'air sur la formation des produits de combustion.**

Le modèle de la flamme cohérente (*fig.1*), qui suppose qu'une flamme turbulente est un assemblage de plusieurs flammelettes laminaires, utilise une cinétique chimique détaillée, les coefficients de transport et les équations de bilan. Avec les résultats obtenus, on crée une librairie de flammelettes pour une large plage de températures d'air et divers degrés de viciation. En effet, le modèle de la flammelette connu sous le nom du modèle local peut être utilisé par un autre modèle global pour la modélisation de flamme turbulente. Les deux modèles, global et local, communiqueront par l'équation de surface de flamme (*fig.7*). Pour plus de détail sur le rôle des flammes laminaires dans la modélisation de la combustion turbulente on se référera aux travaux de Libby, P.A et Williams, F.A. (1982), Libby et al (1983), Bray et al (1984) et Libby et al (1984).

La prise en compte dans les calculs des flammes d'une cinétique chimique détaillée faisant intervenir un nombre important d'espèces et de réactions nécessite un temps de calcul très élevé. Pour remédier à ce problème, plusieurs chercheurs se sont penchés sur la question. Certains d'entre eux ont utilisé des mécanismes réduits qui contiennent un nombre limité d'espèces et de réactions. Pour plus de détails nous référons aux travaux de *Peters (1985)* et *(1986)*. Les travaux de *Peters* constituent une réduction systématique des schémas cinétiques élémentaires. Les travaux de *Pacsko et al (1986)*, *Rogg (1988)* et *Djavdan et al (1991)* montrent que l'utilisation de ces mécanismes réduit considérablement le temps de calcul tout en donnant des résultats satisfaisants.

Nous avons utilisé pour la présente étude deux schémas cinétiques différents. Le premier est à 27 espèces et 100 réactions (*annexe 2*), alors que le deuxième est à 38 espèces et à 162 réactions (*annexe 3*). La différence entre les deux provient du fait que le deuxième tient compte des oxydes d'azote.

Pour une étude plus rigoureuse et plus complète des flammes laminaires, nous n'utiliserons pas des coefficients de transport et de thermodynamique constantes. Au contraire, ils seront évalués à l'aide de polynômes de quatrième degré en température. Nous allons utiliser à cet effet les codes de calcul de *CHEMKIN* et de *TRANSPORT*, voir *Kee et al (1980) (1983)*.

Notre étude se divise en trois parties : dans la première on rappellera quelques paramètres d'étude (richesse, étirement), les équations de bilan ainsi que les propriétés thermodynamiques et de transport. La deuxième partie est consacrée à la modélisation des flammes laminaires étirées de diffusion ainsi qu'aux approximations utilisées pour arriver à



la formulation dite “à étirement constant”. Enfin, la troisième partie est consacrée à la discussion des résultats obtenus.

## 1

# ÉQUATIONS DES MÉLANGES REACTIFS GAZEUX

Dans la première partie de ce chapitre, nous allons définir quelques paramètres utilisés dans les études de combustion, dont l'étirement qui est nécessaire pour l'étude des flammes laminaires.

Dans la deuxième partie, on rappellera les équations qui décrivent les écoulements réactifs gazeux. Ces équations peuvent se diviser en équations de bilan (§1.2), relations thermodynamiques (§1.3), relations de cinétique chimique (§1.4), phénomènes de transfert (§1.5), flux thermiques (§1.6) et relations de transport (§1.7).

## 1.1 Paramètres d'étude

Dans un écoulement avec réactions chimiques, il est nécessaire de définir, en plus des variables d'état classiques (pression, température, vitesse) des variables caractérisant la composition du milieu (*réf.21*) et (*réf.32*).

Pour cela, chaque substance est repérée par l'indice  $j$ . On peut ainsi définir la masse de l'espèce  $j$  comme suit :

$$m_j = n_j M_j, \quad (1)$$

$M_j$  est la masse molaire et  $n_j$  son nombre de moles.

Il en résulte que la masse totale  $m$  est :

$$m = \sum_{j=1}^N m_j, \quad (2)$$

$N$  est le nombre d'espèces composant la masse  $m$ . De même, le nombre de moles total  $n$  est égal à :

$$n = \sum_{j=1}^N n_j. \quad (3)$$

Cette dernière définition nous conduit à l'expression de la masse molaire du mélange :

$$M = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^N n_j M_j. \quad (4)$$

La quantité relative de l'espèce  $j$  dans le mélange est donnée soit par la fraction molaire (5), soit par la fraction massique (6) :

$$X_j = \frac{n_j}{n}, \quad (5)$$

$$Y_j = \frac{m_j}{m}. \quad (6)$$

Les deux relations (5) et (6) vérifient automatiquement l'expression (7) :

$$\sum_{j=1}^N X_j = \sum_{j=1}^N Y_j = 1. \quad (7)$$

Le passage d'un paramètre à l'autre se fait par l'intermédiaire de la relation suivant :

$$Y_j = \frac{M_j}{M} X_j. \quad (8)$$

Les chimistes préfèrent utiliser la concentration molaire, qui fait rapporter la composition au volume :

$$C_j = \frac{n_j}{V_T}, \quad (9)$$

ou encore la masse volumique :

$$\rho_j = \frac{m_j}{V_T}, \quad (10)$$

$V_T$  est le volume total du mélange. La concentration molaire globale  $C$  et la masse volumique totale  $\rho$  sont déduites des deux relations précédentes :

$$C = \sum_{j=1}^N C_j, \quad (11)$$

$$\rho = \sum_{j=1}^N \rho_j. \quad (12)$$

### 1.1.1 La richesse

Le méthane est un hydrocarbure de formule brute  $CH_4$  qui, lorsqu'il brûle complètement avec l'oxygène, fournit du dioxyde de carbone et de la vapeur d'eau comme gaz brûlés. La combustion du  $CH_4$  se fait suivant la réaction :



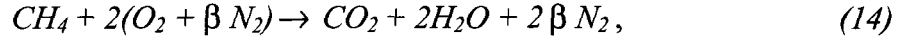
En adoptant comme masse molaire :

$$M_O = 16, \quad M_C = 12.01, \quad M_H = 1.008, \quad M_N = 14.001,$$

la réaction (13) indique que la combustion complète d'un gramme de méthane exige une masse d'oxygène égale à 3.989 g.

Lorsque la combustion s'effectue dans de l'air, il y a lieu de considérer que ce dernier contient 21% en volume ou 23% en poids d'oxygène, le reste étant pratiquement de l'azote

qui n'intervient pas dans la combustion. Dans ce qui précède, une molécule d'air peut être représentée par le couple fictif  $(O_{0.42}, N_{1.58})$  de telle sorte que la réaction chimique du méthane avec l'air s'écrit :



$$\beta = 3.76.$$

La connaissance du débit massique du combustible  $\dot{m}_f$  et du comburant  $\dot{m}_a$ , nous permet de définir la richesse du mélange  $\Phi$  :

$$\Phi = \frac{\alpha}{\alpha_s} = \frac{\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}}{\left(\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}\right)_s}, \quad (15)$$

Dans cette expression, l'indice  $s$  correspond aux conditions stœchiométriques. C'est-à-dire qu'on suppose que la combustion du méthane est complète et se fait suivant la réaction (14). Dans ce cas, la richesse stœchiométrique  $\alpha_s$  est donnée par :

$$\alpha_s = \left(\frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_a}\right)_s = \frac{M_f}{2M_a(1 + \beta)} = 0.0526,$$

où  $M_f$  et  $M_a$  correspondent aux masses molaires du méthane et de l'air respectivement.

Si la richesse du mélange est égale à 1, on dit que le mélange est stœchiométrique par contre si la richesse est inférieure à 1, le mélange est pauvre en combustible alors que s'il est supérieur à 1, le mélange est dit riche en combustible. Pour les combustions avec l'air, on travaille souvent avec un mélange pauvre, c'est seulement ainsi que l'on peut espérer obtenir une combustion complète puisque le mélange (combustible, comburant) ne peut jamais être parfaitement homogène. Il est clair que l'élévation de la température de fin de

combustion est très importante lorsque cette dernière est complète et que les gaz sont moins dilués, c'est à dire pour un mélange homogène dont la richesse est égale à 1.

### 1.1.2 L'étirement

Parmi les paramètres qui s'avèrent importants pour l'étude des flammes laminaires de diffusion on retrouve l'étirement qui est considéré comme un élément indispensable à ajouter au couple : température d'injection des gaz frais et richesse. L'étirement est défini comme étant la moitié du gradient de vitesse à l'infini (*équation 21*). Ceci est mis en évidence par l'écriture de l'équation de conservation de la masse totale (pour plus de détails voir chapitre 2 équation (132)) :

$$\frac{\partial \zeta}{\partial y} + 2\varepsilon \rho U = 0. \quad (16)$$

où  $\varepsilon$  est l'étirement,  $U$  est une vitesse adimensionnée (*équation (126)* du chapitre 2),  $\rho$  est la masse volumique et  $\zeta$  est le flux massique.

Les conditions aux limites du côté fuel (*fig.8*) c'est-à-dire en  $y = -\infty$ , données par les équations (17) et (18) nous permettent de supposer l'expression (19).

$$T_{-\infty} = T_{\text{méthane}}, \quad (17)$$

$$U(-\infty) = 1, \quad (18)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial y}(-\infty) = 0. \quad (19)$$

L'équation de conservation de la masse devient alors :

$$\left. \frac{\partial V}{\partial y} \right]_{-\infty} + 2\varepsilon = 0, \quad (20)$$

où  $V$  est la composante axiale de la vitesse. Le taux d'étirement s'écrit alors :

$$\varepsilon = \left. \frac{-1}{2} \frac{\partial V}{\partial y} \right]_{y=-\infty}. \quad (21)$$

Si on suppose que l'équation (20) est valable dans tout le domaine de calcul, l'hypothèse d'un écoulement potentiel, *Rolon (1988)*, permet l'écriture des expressions des composantes axiale et radiale de la vitesse :

$$V = -2\varepsilon y, \quad (22)$$

$$u = \varepsilon x. \quad (23)$$

Le taux d'étirement expérimental peut être calculé à partir de la vitesse d'injection des gaz frais. Pour déterminer sa valeur dans les calculs expérimentaux, plusieurs auteurs l'ont relié aux grandeurs géométriques du dispositif expérimental. Ainsi *Spalding (1961)* proposa :

$$\varepsilon_e = \frac{V_0}{D}, \quad (24)$$

où  $V_0$  est la vitesse d'injection des gaz frais et  $D$  le diamètre du brûleur. Une autre approche consiste à exprimer le taux d'étirement expérimental en fonction de la distance entre les deux brûleurs  $H$ . Ainsi, en supposant une répartition linéaire du profil de vitesse correspondant à un écoulement potentiel, on obtient :

$$V\left(\frac{H}{2}\right) = V_0, \quad (25)$$

$$V(0) = 0, \quad (26)$$

$$\varepsilon_e = 2 \frac{V_0}{H}. \quad (27)$$

Notons que l'usage de l'équation (21) donnera :

$$\varepsilon_e = \frac{V_0}{H}. \quad (28)$$

Les définitions de l'étirement expérimental données par les expressions (24) et (27) ont été utilisées par de nombreux auteurs dans des études des flammes laminaires étirées de diffusion et de prémélange dont voici quelques-uns : *Rolon (1988)*, *Djavdan (1990)* et *Sennoun (1994)*.

Dans le cadre de l'étude des flammes de prémélange, les travaux de *Sennoun (1994)* ont montré une nette différence entre le taux d'étirement expérimental obtenu par les équations (24) et (27) et l'étirement théorique. Les travaux de *Law et al (1986)*, *Dixon-Lewis et al (1988)*, *Kee et al (1988)* montrent qu'en plus de la richesse et de la température d'injection des gaz frais, l'étirement reste un paramètre nécessaire pour une étude complète et une meilleure comparaison entre la théorie et l'expérience.

## 1.2 Équations de bilan

Les équations de bilan pour un fluide réactif traduisent la conservation de la masse totale, de la masse de chaque constituant, de quantité de mouvement et de l'énergie. Ces équations seront écrites sans démonstration dans ce paragraphe. Pour plus de détails sur leur dérivation à partir de la théorie cinétique des gaz et sur leurs limites de validité, on pourra consulter les références (*réf.2*) et (*réf.52*).



*Bilan de masse totale :*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0. \quad (29)$$

Elle constitue l'équation de continuité dans un milieu multiréactif. Dans l'expression (29),  $\rho$  désigne la masse volumique totale et  $V$  le vecteur vitesse.

*Bilan de masse partielle :*

$$\rho \frac{dY_j}{dt} + \nabla \cdot (\rho Y_j V_{D_j}) = \dot{W}_j \quad j=1,2,\dots,N. \quad (30)$$

L'équation (30) est l'équation de conservation des espèces chimiques. Dans cette expression,  $Y_j$  est la fraction massique de l'espèce  $j$ ,  $V_{D_j}$  sa vitesse de diffusion et  $\dot{W}_j$  son taux de production massique par unité de volume.

*Bilan de quantité de mouvement :*

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla \bar{P} + \sum_{j=1}^N \rho_j f_j, \quad (31)$$

$$\bar{P} = pI + \Pi. \quad (32)$$

la variable  $f_j$  désigne la force extérieure par unité de masse agissant sur la  $j^{\text{ème}}$  espèce et  $I$  est la matrice unité.  $\bar{P}$  est le tenseur des pressions, il comprend les tensions internes dues à la pression  $p$  et le tenseur des contraintes de viscosité  $\Pi$ . En fonction de ces variables, l'équation de conservation de (31) devient :

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla p - \nabla \cdot \Pi + \sum_{j=1}^N \rho Y_j f_j . \quad (33)$$

*Bilan d'énergie :*

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) e = -\nabla q - \bar{P} : \nabla V + \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{Dj} f_j , \quad (34)$$

où  $e$  désigne l'énergie interne massique,  $q$  le flux de chaleur et  $( : )$  le produit tensoriel. En introduisant l'enthalpie massique  $h$  du mélange (36), et en utilisant l'équation de quantité de mouvement (31), l'équation de l'énergie s'écrit alors :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) h = -\nabla q - \Pi : \nabla V + \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{Dj} f_j + \frac{\partial p}{\partial t} + (V \cdot \nabla) p , \quad (35)$$

$$h = e + \frac{p}{\rho} . \quad (36)$$

L'équation (35) est un résultat du principe de conservation de l'énergie. Cette équation, ainsi que l'expression de l'enthalpie  $h(T, Y_1, Y_2, \dots, Y_N)$  en fonction de la température absolue  $T$  et des fractions massiques  $Y_j$ , nous permettra d'obtenir une équation de bilan pour la température  $T$ .

Les équations de bilan qui régissent les mélanges réactifs gazeux ne forment pas un système fermé. Il est donc nécessaire de les compléter par :

- Les relations thermodynamiques qui expriment différentes grandeurs thermodynamiques comme  $\rho$ ,  $h$ , ... en fonction des variables d'état.

- Les relations de cinétique chimique qui donnent l'expression du taux de production massique  $\dot{W}_j$  en fonction des variables d'état.
- Les relations de transport qui expriment les vitesses de diffusion  $V_{D_j}$ , le flux de chaleur  $q$  et le tenseur des pressions  $\bar{P}$  en fonction de la vitesse  $V$ , des variables d'état  $T, p, Y_j$  et de leur gradient.

Ces relations sont données dans la section suivante. Enfin, nous considérons la masse volumique  $\rho$ , la vitesse moyenne  $V$ , la pression thermodynamique  $p$ , les fractions massiques des espèces chimiques  $Y_j$  et la température  $T$  comme étant les variables fondamentales des équations de bilan.

### 1.3 Variables thermodynamiques

L'étude thermodynamique d'un système vise à trouver, à l'équilibre thermodynamique, une relation entre les variables d'état. Dans cette étude, le gaz est considéré parfait, et l'équation d'état s'écrit :

$$pV_T = nRT, \quad (37)$$

$R$  est la constante universelle des gaz parfaits qui est égale à :

$$R = 8.31 \text{ J/mol.K} \quad (38)$$

L'enthalpie massique du mélange  $h$  s'exprime en fonction des enthalpies massiques  $h_j$  des espèces qui constituent le mélange par la relation :

$$h = \sum_{j=1}^N Y_j h_j . \quad (39)$$

En supposant que le gaz est parfait, on peut écrire l'enthalpie massique  $h_j$  en fonction de la température sous la forme :

$$h_j(T) = h_j(T_0) + \int_{T_0}^T c_{p_j}(T') dT' . \quad (40)$$

En supposant le gaz parfait, la chaleur massique à pression constante  $c_p$  ainsi que la chaleur massique de l'espèce  $j$  à pression constante  $c_{p_j}$  s'écrivent :

$$c_{p_j} = \left. \frac{\partial h_j}{\partial T} \right|_p , \quad (41)$$

$$c_p = \sum_{j=1}^N Y_j c_{p_j} . \quad (42)$$

D'après les équations (39) et (40) et en utilisant les expressions (41) et (42), l'enthalpie du mélange  $h$  est donnée par la relation suivante :

$$h = \sum_{j=1}^N Y_j h_j(T_0) + \int_{T_0}^T c_p(T') dT' . \quad (43)$$

De façon analogue, l'entropie massique du mélange  $s$  s'exprime en fonction des entropies massiques  $s_j$  des espèces chimiques :

$$s = \sum_{j=1}^N Y_j s_j . \quad (44)$$

La dépendance en température de l'entropie massique fait intervenir l'entropie de formation standard  $s_j(T_0, p_{atm})$  de l'espèce  $j$  à la température  $T_0$  et à la pression de référence  $p_{atm}$ . De façon générale, l'entropie massique  $s_j$  s'écrit :

$$s_j = s_j(T_0, p_{atm}) + \int_{T_0}^T \frac{c_{p_j}(T')}{T'} dT' - \frac{R}{M_j} \text{Log} \frac{p_j}{p_{atm}}, \quad (45)$$

$p_j$  est la pression partielle de la  $j^{\text{ème}}$  espèce. Elle est calculée par la relation de *Dalton* (réf.32). En particulier, si on note  $s_j^0 = s_j^0(T, p_{atm})$  l'entropie de l'espèce  $j$  à la pression atmosphérique  $p_{atm}$ , on a alors la relation suivante :

$$s_j^0 = s_j(T_0, p_0) + \int_{T_0}^T \frac{c_{p_j}(T')}{T'} dT'. \quad (46)$$

Enfin les propriétés thermodynamiques massiques  $s_j^0$ ,  $c_{p_j}$  et  $h_j$  qui ont servi à l'établissement de ces relations sont déduites des propriétés thermodynamiques molaires correspondantes  $S_j^0$ ,  $C_{p_j}$  et  $H_j$  par les relations :

$$c_{p_j} = \frac{C_{p_j}}{M_j}, \quad h_j = \frac{H_j}{M_j}, \quad s_j^0 = \frac{S_j^0}{M_j}. \quad (47)$$

Les propriétés thermodynamiques molaires  $C_{p_j}$ ,  $H_j$ ,  $S_j^0$  sont évaluées par des polynômes d'approximation. Cette méthode est moins coûteuse en temps de calcul qu'une interpolation à partir de tables numériques. Pour les calculs présentés dans ce mémoire, nous avons utilisé les polynômes d'approximation communs à plusieurs codes de calculs. Nous avons utilisé un code *NASA* de calcul d'équilibres (réf.23) et un code *SANDIA* d'écriture automatique des grandeurs thermochimiques *CHEMKIN* (réf.24). Dans ces

codes, les chaleurs molaires à pression constante sont écrites sous la forme de polynômes du quatrième degré de la température et sur deux intervalles d'approximations  $[T_{\text{inf}}, T_{\text{med}}]$  et  $[T_{\text{med}}, T_{\text{sup}}]$  :

$$\frac{C_{p_j}}{R} = a_{1j} + a_{2j}T + a_{3j}T^2 + a_{4j}T^3 + a_{5j}T^4, \quad \text{si } T_{\text{inf}} \leq T \leq T_{\text{med}}, \quad (48)$$

$$\frac{C_{p_j}}{R} = a_{8j} + a_{9j}T + a_{10j}T^2 + a_{11j}T^3 + a_{12j}T^4, \quad \text{si } T_{\text{med}} \leq T \leq T_{\text{sup}}, \quad (49)$$

de telle sorte que les enthalpies molaires correspondantes sont :

$$\frac{H_j}{RT} = a_{1j} + \frac{a_{2j}}{2}T + \frac{a_{3j}}{3}T^2 + \frac{a_{4j}}{4}T^3 + \frac{a_{5j}}{5}T^4 + \frac{a_{6j}}{T}, \quad \text{si } T_{\text{inf}} \leq T \leq T_{\text{med}}, \quad (50)$$

$$\frac{H_j}{RT} = a_{8j} + \frac{a_{9j}}{2}T + \frac{a_{10j}}{3}T^2 + \frac{a_{11j}}{4}T^3 + \frac{a_{12j}}{5}T^4 + \frac{a_{13j}}{T}, \quad \text{si } T_{\text{med}} \leq T \leq T_{\text{sup}}, \quad (51)$$

où  $a_{6j}$  et  $a_{13j}$  sont des enthalpies de référence reliées aux enthalpies de formation standards à  $0^\circ \text{ K}$ . Les entropies molaires à une atmosphère sont :

$$\frac{S_j^0}{R} = a_{1j} \log T + a_{2j}T + \frac{a_{3j}}{2}T^2 + \frac{a_{4j}}{3}T^3 + \frac{a_{5j}}{4}T^4 + a_{7j}, \quad \text{si } T_{\text{inf}} \leq T \leq T_{\text{med}}, \quad (52)$$

$$\frac{S_j^0}{R} = a_{8j} \log T + a_{9j}T + \frac{a_{10j}}{2}T^2 + \frac{a_{11j}}{3}T^3 + \frac{a_{12j}}{4}T^4 + a_{14j}, \quad \text{si } T_{\text{med}} \leq T \leq T_{\text{sup}}, \quad (53)$$

où  $a_{7j}$  et  $a_{14j}$  sont des entropies de référence reliées aux entropies de formation à  $0^\circ \text{ K}$ . De plus, la température intermédiaire peut dépendre des espèces dans le code *CHEMKIN* :

$$T_{\text{med}} = T_{\text{med}_j}. \quad (54)$$

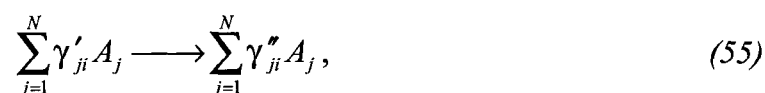
## 1.4 Cinétique chimique

Les écoulements avec réactions chimiques ont fait l'objet ces dernières années de très nombreux travaux. Il y a encore trente ans, ce type d'écoulement n'intéressait que les spécialistes de la combustion et les schémas théoriques étaient simples.

La combustion met en jeu de nombreuses réactions élémentaires et chacune d'entre elles engendre plusieurs espèces chimiques. Écrire la chimie sous la forme d'une seule réaction ne permet pas de comprendre l'aspect hybride des flammes.

La cinétique chimique est actuellement un vaste domaine de la chimie en constante progression. Le phénomène le plus important du point de vue de la flamme est la production des espèces par réactions chimiques. Un gros effort est fait pour améliorer nos connaissances dans ce domaine mais, il est vain de vouloir résumer la situation en quelques pages. Les équations utilisées ont été établies à partir de la théorie des collisions (*réf.52*). Il existe actuellement d'autres théories plus précises mais plus complexes et plus coûteuses en temps de calcul.

Une réaction élémentaire non réversible s'écrit sous la forme :



dans cette écriture  $\gamma'_{ji}$  et  $\gamma''_{ji}$  sont les coefficients stœchiométriques de la  $j^{\text{ème}}$  espèce dans la  $i^{\text{ème}}$  réaction. Ces coefficients sont des entiers positifs ou nuls,  $A_j$  est le symbole chimique de l'espèce  $j$ . Il peut figurer dans les deux membres de la réaction avec des coefficients  $\gamma'_{ji}$  et  $\gamma''_{ji}$  différents.

L'équation (55) peut s'écrire de la façon suivante :

$$\sum_{j=1}^N (\gamma''_{ji} - \gamma'_{ji}) A_j = 0, \quad (56)$$

on peut définir le terme  $a_j$  par la relation (57), ce terme va être utilisé plus loin pour la définition du degré d'avancement :

$$a_j = \sum_{i=1}^N a_{ji} = \sum_{i=1}^N (\gamma''_{ji} - \gamma'_{ji}). \quad (57)$$

L'écriture des réactions chimiques apporte une information supplémentaire en ce qui concerne la production des espèces qui évoluent dans le système. *Hirschfelder, J.O. et al (1954)* ont introduit un terme appelé degré d'avancement  $\xi$ . Ce terme est défini par l'équation (58). La réaction (56) a alors un degré d'avancement  $\xi_i$  qui peut être utilisé au changement de masse par l'équation (59) :

$$\xi = \frac{n_j - n_j^0}{a_j}. \quad (58)$$

$$m_{ji} - m_{ji}^0 = a_{ji} M_j \xi_i, \quad (59)$$

$m_{ji}^0$  est la masse initiale de l'espèce  $j$  dans la réaction  $i$ ,  $n_j$  représentent le nombre de mole initiale de l'espèce  $j$  et  $n_j^0$  le nombre de mole de l'espèce  $j$  après que la réaction  $i$  a lieu.

Dans le cas d'un mélange à plusieurs réactions, nous avons une valeur de degré d'avancement  $\xi_i$  par réaction de telle sorte que la relation (59) s'écrit sous la forme :

$$m_j - m_j^0 = \sum_{i=1}^K a_{ji} M_j \xi_i, \quad (60)$$

où  $K$  est le nombre de réactions chimiques dans le mélange réactif.



L'équation (60) nous renseigne sur la masse de l'espèce  $j$  après la réaction, or il est plus utile de travailler avec les taux de productions massiques. Certains chimistes préfèrent utiliser le mot vitesse spécifique; ainsi, le taux massique de production de l'espèce  $j$   $\dot{W}_j$ , c'est à dire la masse de l'espèce  $j$  produite par unité de temps et par unité de volume, s'écrit pour une réaction au repos :

$$\dot{W}_j = \frac{d\rho_j}{dt} = M_j \frac{dC_j}{dt}, \quad (61)$$

$\rho_j$  est la masse volumique de la  $j^{ème}$  espèce,  $M_j$  sa masse molaire et  $C_j$  sa concentration molaire. Et pour  $K$  réactions :

$$\dot{W}_j = \sum_{i=1}^K \dot{W}_{ji}. \quad (62)$$

où  $\dot{W}_{ji}$  est le taux de production massique de l'espèce  $j$  dans la réaction  $i$ .

La théorie des collisions nous permet d'évaluer le taux de production massique en utilisant des modèles plus simples. Pour plus de détails voir *Barrère et Prud'homme (1973)*. Ainsi, le taux de production massique de la  $j^{ème}$  espèce dans la  $i^{ème}$  réaction s'écrit :

$$\dot{W}_{ji} = M_j (\gamma_{ji}'' - \gamma_{ji}') k_B \prod_{j=1}^N C_j^{\gamma_{ji}'} , \quad (63)$$

$$k_B = \beta T^\alpha \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right). \quad (64)$$

La variable  $k$  est appelée constante de la réaction. Elle dépend de la température et de la pression. Dans la formule (64)  $\beta T^\alpha$  est le facteur de fréquence,  $E_i$  l'énergie d'activation de la  $i^{ème}$  réaction et  $R$  est la constante universelle des gaz parfaits.

On a par ailleurs l'égalité suivante :

$$\exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) = \exp\left(\frac{-T_i}{T}\right), \quad (65)$$

où  $T_i$  représente la température d'activation de la  $i^{ème}$  réaction. Cette égalité définit la probabilité statistique de *Boltzmann* pour qu'une molécule possède l'énergie  $E_i$ . Le rôle de l'exponentielle est très important dans l'évaluation de  $k_B$  en fonction de la température. Suivant les valeurs de l'énergie d'activation, la variation de  $k_B$  peut être très lente ou très rapide. Cette variation dépend fortement de la valeur  $T_i$ . Il y a lieu de noter que les valeurs  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $E_i$  sont déterminées expérimentalement et pour une large plage de températures et de pressions.

Généralement, les réactions élémentaires sont réversibles :

$$\sum_{j=1}^N \gamma'_{ji} A_j \xrightleftharpoons[k_r]{k_d} \sum_{j=1}^N \gamma''_{ji} A_j, \quad (66)$$

dans cette écriture  $\gamma'_{ji}$  et  $\gamma''_{ji}$  sont les coefficients stœchiométriques de la  $j^{ème}$  espèce dans la  $i^{ème}$  réaction. Ces coefficients sont des entiers positifs ou nuls. Dans ce cas, le taux de production massique de l'espèce  $j$  dans la réaction  $i$  et la constante d'équilibre directe s'écrivent :

$$\dot{W}_{ji} = M_j (\gamma'_{ji} - \gamma''_{ji}) \left( k_{d_i} \prod_{j=1}^N C_j^{\gamma'_{ji}} - k_{r_i} \prod_{j=1}^N C_j^{\gamma''_{ji}} \right), \quad (67)$$

$$k_{d_i} = \beta_j T^{\alpha_j} \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right). \quad (68)$$

La loi d'*Arrhénius* permet d'estimer la constante de réaction inverse  $k_{r_i}$ . On peut également introduire la constante d'équilibre  $k_{e_i}$ . En effet,  $k_{e_i}$  est reliée à la constante de réaction directe  $k_{d_i}$  et à la constante d'équilibre  $k_{e_i}$  par la relation :

$$k_{r_i} = \frac{k_{d_i}}{k_{e_i}}. \quad (69)$$

Ainsi, la constante d'équilibre  $k_{e_i}$  de la réaction globale est donnée par la thermodynamique :

$$k_{e_i} = \left( \frac{p_{atm}}{RT} \right)^{\Delta \gamma_i} \exp(\Delta Z_j), \quad (70)$$

$$\Delta \gamma_i = \sum_{j=1}^N a_{ji} ; \quad \Delta Z_i = \sum_{j=1}^N \gamma_{ji} Z_j ; \quad Z_j = \frac{S_j^0}{R} - \frac{H_j}{RT}. \quad (71)$$

L'estimation de la constante de réaction inverse  $k_{r_i}$  est plus précise en utilisant la constante d'équilibre  $k_{e_i}$  au lieu de la loi d'*Arrhénius*, car cette constante est déterminée à partir des variables thermodynamiques qui sont connues avec précision alors qu'il existe une grande incertitude sur les facteurs de fréquences  $\beta$  et  $\alpha$ .

## 1.5 Phénomènes de transfert

Le développement d'une réaction de combustion dans un temps fini conduit nécessairement à des gradients de concentration, de vitesse et de température pour chacune des espèces présentes dans la réaction. Ces espèces produisent à leur tour des échanges de matière, de chaleur et d'énergie.

La vitesse de diffusion est obtenue par une méthode basée sur l'analyse du mouvement des molécules, cette méthode a été développée par *F.A Williams (1965)*. La vitesse de diffusion est obtenue en considérant l'écoulement des espèces à l'échelle moléculaire et en analysant leurs répercussions sur le mouvement d'ensemble macroscopique. Pour plus de détails voir l'annexe 1.

La vitesse de diffusion peut s'écrire sous la forme :

$$V_{D_j} = v_j + w_j + u \quad j = 1, \dots, N, \quad (72)$$

$v_j$  est le vecteur de diffusion ordinaire dû au gradient de concentration de l'espèce  $j$ ,  $w_j$  est le vecteur de diffusion thermique et  $u$  est une vitesse de diffusion.

L'expression de  $v_j$  provient des travaux de *Hirschfelder.(1954)* :

$$v_j = - \left( \frac{1}{X_j} \right) D_j^H \nabla X_j \quad j = 1, \dots, N, \quad (73)$$

$X_j$  représente la fraction molaire de l'espèce  $j$ ,  $D_j^H$  est le coefficient de diffusion binaire dans le mélange. Il s'exprime en fonction des autres coefficients de diffusion binaire  $D_{jk}$  :

$$D_j^H = \frac{1 - Y_j}{\sum_{\substack{k \neq j \\ j=1}}^N \frac{X_k}{D_{jk}}}, \quad (74)$$

le vecteur de diffusion thermique a pour expression :

$$w_j = \frac{D_j^H D_{T,j}}{X_j} \frac{1}{T} \nabla T. \quad (75)$$

$D_{T,j}$  est le facteur de diffusion thermique. Les coefficients  $D_{jk}$  et  $D_{T,j}$  seront définis au chapitre (§1.7). Quant à  $u$  elle est donnée par :

$$u = \sum_{k=1}^N \frac{D_k^H Y_k}{X_k} \left( \nabla X_k - D_{T,k} \frac{\nabla T}{T} \right). \quad (76)$$

Il est à noter que l'effet du gradient thermique conduit à une diffusion connue sous le nom d'effet *Soret*. Pour une analyse plus complète de l'effet *Soret*, l'effet *Dufour* et des vitesses de diffusion ainsi que toutes les étapes de ce calcul on peut consulter les références (2) et (52). Il faut noter également que l'expression (72) est une approximation pour la vitesse de diffusion qui ne satisfait pas forcément l'expression (77). Par conséquent, une correction est indispensable. Une technique consiste à écrire la vitesse de diffusion sous la forme (78).

$$\sum_{j=1}^N Y_j V_{D_j} = 0, \quad (77)$$

$$V_{D_j} = (v_j + w_j + u) + v_c. \quad (78)$$

Si on tient compte de (77), la vitesse de correction a pour expression :

$$v_c = - \sum_{j=1}^N Y_j \left( \left( \frac{-1}{X_j} \right) D_j^H \nabla X_j + \frac{D_j^H D_{T,j}}{X_j} \frac{1}{T} \nabla T + \sum_{k=1}^N \frac{D_k^H Y_k}{X_k} \left( \nabla X_k - D_{T,k} \frac{\nabla T}{T} \right) \right). \quad (79)$$

La vitesse de correction  $v_c$  est indépendante des espèces chimiques mais, elle peut varier spatialement. Elle est introduite pour assurer la condition (77).

## 1.6 Flux thermique

À partir des relations phénoménologiques d'*Onsager*, le calcul du flux de chaleur  $q$  fait apparaître une somme de quatre termes :

- La conduction de la chaleur dans le gaz :

$$-\lambda \nabla T, \quad (80)$$

$\lambda$  est la conductivité thermique du mélange.

- Le flux de chaleur dû au rayonnement :

$$q_r. \quad (81)$$

- L'apport d'énergie par diffusion des molécules d'espèce  $j$ . Ce terme est égal au produit du flux de diffusion  $\rho_j V_{D_j}$  par l'enthalpie massique  $h_j$ . Le terme relatif à toutes les molécules devient :

$$\sum_{j=1}^N \rho_j V_{D_j} h_j. \quad (82)$$

- Le terme correspondant à l'effet *Dufour*, qui est un terme de couplage dû aux gradients de concentration, de pression et de température, s'écrit :

$$RT \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \frac{X_j D_{T,j}}{M_j D_{jk}} (V_{D_j} - V_{D_k}). \quad (83)$$

Dans nos calculs numériques, nous avons négligé les flux de chaleur dus à l'effet *Dufour* et au rayonnement. Dans ce cas, le flux total de chaleur a pour expression :

$$q = -\lambda \nabla T + \sum_{j=1}^N \rho_j V_{D_j} h_j. \quad (84)$$

## 1.7 Propriétés de transport

Nous venons de définir aux paragraphes précédents le tenseur des contraintes de viscosité  $\Pi$ , ainsi que trois coefficients de transfert : deux coefficients de diffusion,  $D_{T,j}$ ,

$D_{jk}$  et un coefficient de conductivité  $\lambda$  qui seront utilisés dans les équations de bilan. Il est donc nécessaire d'exprimer ces coefficients de transfert en fonction des variables d'état.

En négligeant les phénomènes de viscosité volumique, le tenseur des contraintes de viscosité s'écrit :

$$\Pi = -\nu \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) I + \nu (\nabla V + (\nabla V)^T), \quad (85)$$

Le coefficient de viscosité cinématique du mélange  $\nu$  dans un milieu comportant de nombreuses espèces peut être déduit de la relation suivante :

$$\nu = \frac{\sum_{j=1}^N \frac{X_j^2}{\nu_j}}{\frac{X_j^2}{\nu_j} + 1.385 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N \frac{X_j X_k k_B T}{p M_j D_{jk}}}. \quad (86)$$

Une expression plus simple que (86) est souvent utilisée :

$$\nu = \frac{1}{2} \left( \sum_{j=1}^N X_j \nu_j + \frac{1}{\sum_{j=1}^N X_j (\nu_j)^{-1}} \right). \quad (87)$$

Une théorie cinétique plus rigoureuse donne comme expression au terme de viscosité  $\nu_j$  :

$$\nu_j = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi M_j k_B T}}{\pi \sigma_j^2 \Omega^{(2,2)*}}. \quad (88)$$

$\sigma_j$  est le diamètre de collision du potentiel d'interaction de *Lennard-Jones* et  $\Omega^{(2,2)*}$  est une intégrale réduite de collision.

Pour chaque espèce  $j$ , la conductivité thermique est exprimée par la relation suivante :

$$\lambda_j = \frac{25}{32} \frac{\sqrt{\pi M_j k_B T}}{\pi \sigma_j^2 \Omega^{(2,2)*}} \frac{c_v}{M_j}, \quad (89)$$

où  $c_v$  est la chaleur massique à volume constant d'une molécule.

La détermination du coefficient de conductivité thermique du mélange est très complexe et différentes relations ont été proposées. L'expression la plus courante est sous la forme :

$$\lambda = \frac{I}{2} \left( \sum_{j=1}^N X_j \lambda_j + \frac{I}{\sum_{j=1}^N X_j (\lambda_j)^{-1}} \right). \quad (90)$$

Pour le calcul du coefficient de diffusion binaire  $D_{jk}$  une relation plus rigoureuse est obtenue à partir de la théorie cinétique des gaz, ainsi :

$$D_{jk} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{\frac{2\pi k_B^3 T^3}{M_{jk}}}}{\rho \pi \sigma_{jk}^2 \Omega_{j,k}^{(1,1)*}}. \quad (91)$$

Dans cette relation  $\Omega_{j,k}^{(1,1)*}$  est une intégrale réduite,  $\sigma_{jk}$  est le diamètre du couple d'espèces  $(j,k)$ ,  $M_{jk}$  est la masse réduite de la paire  $(j,k)$  qui est donnée par :

$$M_{jk} = \frac{M_j M_k}{M_j + M_k}. \quad (92)$$

Finalement, les facteurs de diffusion thermique élémentaire  $D_{T,jk}$  et  $D_{T,j}$  sont estimés par les relations suivantes :

$$D_{T,jk} = \frac{15}{2} \frac{(2A_{jk}^* + 5)(6C_{jk}^* - 5)}{A_{jk}^* (16A_{jk}^* - 12B_{jk}^* + 55)} \frac{M_k - M_j}{M_k + M_j} X_j X_k, \quad (93)$$



$$D_{T,j} = \sum_{\substack{k \neq j \\ k=1}}^N D_{T,jk} , \quad (94)$$

$$A_{jk}^* = \frac{\Omega_{j,k}^{(2,2)*}}{\Omega_{j,k}^{(1,1)*}} , \quad (95)$$

$$B_{jk}^* = \frac{5\Omega_{j,k}^{(1,2)*} - 4\Omega_{j,k}^{(1,3)*}}{\Omega_{j,k}^{(1,1)*}} \quad (96)$$

$$C_{jk}^* = \frac{\Omega_{j,k}^{(1,2)*}}{\Omega_{j,k}^{(1,1)*}} . \quad (97)$$

Les intégrales de collision utilisées plus haut se déduisent à partir des intégrales de collision suivantes :

$$\Omega_{j,k}^{(l,s)} = \sqrt{\frac{2\pi k_B T}{M_{jk}}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\delta^2} \delta^{(2s+3)} [1 - \cos^l \chi] \sigma d\sigma d\delta , \quad (98)$$

$k_B$  est la constante de *Boltzmann*,  $\chi$  l'angle de déviation des deux molécules  $j$  et  $k$  après la collision,  $\delta$  est un paramètre qui est donné par la relation (99). Dans l'équation (99),  $g$  est une vitesse relative qui est égale à la vitesse de l'espèce  $j$  moins celle de  $k$  avant la collision :

$$\delta = \sqrt{\frac{M_{jk} g^2}{2k_B T}} . \quad (99)$$

Pour plus de détail et d'explication sur ces intégrales de collision on se réfère à la référence (réf.21). Ainsi, les intégrales réduites se déduisent en comparant les intégrales de collision avec celles obtenues en supposant des sphères élastiques pour les molécules  $j$  et  $k$  :

$$\Omega^{(l,s)*} = \frac{\Omega^{(l,s)}}{\Omega_{sph.\acute{e}lastique}^{(l,s)}} = \frac{\Omega^{(l,s)} \sqrt{\frac{2\pi M_{jk}}{k_B T}}}{\frac{1}{2}(s+1)! \left(1 - \frac{1+(-1)^s}{2(1+l)}\right) \pi d^2}. \quad (100)$$

Dans cette expression,  $s$  et  $l$  sont des entiers qui varient d'un calcul à l'autre. Par exemple :

- $s=l=1$  pour le calcul des coefficients de diffusion.
- $s=l=2$  pour le calcul des coefficients de viscosité.

Les formules précédentes apparaissent relativement complexes, mais dans la pratique elles sont présentées par des polynômes de température. Pour une analyse plus complète de ces relations et de leurs limites de validité, voir (réf.21).

## 1.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les principaux paramètres d'études de combustion. Nous avons défini l'étirement théorique comme étant le gradient de la vitesse à l'infini, ainsi que quelques définitions expérimentales de l'étirement et de la richesse.

Nous avons cité les équations des mélanges réactifs gazeux, présenté les variables thermodynamiques, l'équation d'état ainsi que l'expression de l'enthalpie et les approximations utilisées pour les calculer.

La cinétique chimique utilisée a été décrite en détails. L'expression des taux de production, les phénomènes de transport, l'expression du flux thermique et le tenseur des contraintes de viscosité ont également été cités.

## 2

# MODÉLISATION DES FLAMMES LAMINAIRES

Les équations qui régissent les écoulements réactifs gazeux, rappelées dans la section précédente, tiennent compte de nombreux phénomènes qui sont négligeables pour les flammes laminaires (§2.1). Les vitesses des gaz dans ces flammes sont très faibles de telle sorte que les variations relatives d'ordre deux du nombre de Mach des différentes grandeurs sont négligeables (§2.2). Ces diverses approximations permettent de simplifier les équations des mélanges réactifs gazeux et d'obtenir les équations des flammes isobares (§2.3). Ces équations seront ensuite adaptées pour des flammes de diffusion étirées (§2.4), (§2.5). On expliquera finalement la méthode utilisée pour résoudre ces équations.

## 2.1 Approximations pour les flammes laminaires

L'effet *Dufour* est représenté par le terme (83) dans l'expression du flux de chaleur  $q$ . Ce terme qui représente le couplage entre les gradients de concentration, de température et de pression est toujours très faible dans les flammes laminaires et peut être négligé. Le flux total de chaleur dû au rayonnement  $q_r$  peut aussi être négligé. Dans ce cas, le flux de chaleur s'écrit (en ne conservant que la conduction de la chaleur dans le gaz et l'apport d'énergie par diffusion des espèces.) :

$$q = -\lambda \nabla T + \sum_{j=1}^N \rho h_j Y_j V_{D_j}. \quad (101)$$

Pour l'évaluation de la viscosité  $\nu$  du mélange et de la conductivité thermique  $\lambda$  on utilisera les relations (87) et (89). Les vitesses de diffusion simplifiées (72) sont retenues après les approximations de *Hirschfelder (1954)* :

$$V_{D_j} = -D_j^H \frac{1}{X_j} \nabla X_j + \frac{D_j^H D_{T,j}}{X_j} \frac{1}{T} \nabla T + \sum_{k=1}^N \frac{D_k^H Y_k}{X_k} \left( \nabla X_k - D_{T,k} \frac{1}{T} \nabla T \right). \quad (102)$$

Le facteur de diffusion thermique  $D_{T,j}$  qui représente l'effet *Soret*, est nul pour la plupart des espèces légères ( $H$ ,  $H_2$ ). Toutefois, il reste très faible (une valeur égale à 0.1) pour les flammes laminares. Donc, l'effet *Soret* sera négligé dans la plupart des applications numériques de ce mémoire. L'expression de la vitesse de diffusion devient ainsi :

$$V_{D_j} = -D_j^H \frac{\nabla X_j}{X_j} + \sum_{k=1}^N \frac{D_k^H Y_k}{X_k} \nabla X_k. \quad (103)$$

Finalement, les forces massiques externes  $f_j$  agissant sur les espèces chimiques sont négligeables. Ainsi, les termes de forces des équations d'énergie  $\sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{D_j} f_j$  et de la

quantité de mouvement  $\sum_{j=1}^N \rho Y_j f_j$  sont nuls.

## 2.2 Approximations du faible nombre de Mach

Avec les approximations de la section précédente (§2.1) et en utilisant l'expression (100), les équations de conservation de l'énergie et de quantité de mouvement s'écrivent :

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) h = -\nabla \cdot \left( -\lambda \nabla T - \sum_{j=1}^N \rho h_j Y_j V_{D_j} \right) - \Pi : \nabla V + \frac{\partial p}{\partial t} + (V \cdot \nabla) p, \quad (104)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ \mu \left( \nabla V + (\nabla V)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) \mathbf{I} \right) \right\}. \quad (105)$$

Le passage des équations régissant les écoulements réactifs gazeux (104) et (105) aux équations des flammes laminares à faible nombre de Mach nécessite la compréhension et l'analyse des différentes grandeurs thermodynamiques qui constituent la flamme. Pour plus de détails voir *Giovangigli (1988)*. Les variations spatiales de la pression peuvent être négligées en décomposant la pression sous la forme :

$$p = p_u + \tilde{p},$$

$p_u$  est une pression spatialement uniforme qui peut dépendre du temps, alors que  $\tilde{p}$  est une perturbation de  $p_u$ . Dans ce cas, les équations d'état c'est-à-dire l'équation de conservation de quantité de mouvement et l'équation de conservation de l'énergie, s'écrivent :

$$\rho = \frac{p_u M}{RT}, \quad (106)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \left\{ \mu \left( \nabla V + (\nabla V)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) \mathbf{I} \right) \right\}, \quad (107)$$

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) h = -\nabla \cdot \left( -\lambda \nabla T + \sum_{j=1}^N \rho h_j Y_j V_{D_j} \right) + \frac{\partial p_u}{\partial t}. \quad (108)$$

## 2.3 Équations des flammes isobares

Si on rassemble maintenant les équations (29), (30), (106) à (108), on obtient la forme simplifiée du système régissant les flammes isobares :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0, \quad (109)$$

$$\rho \frac{\partial Y_j}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) Y_j = -\nabla \cdot (\rho Y_j V_{D_j}) + \dot{W}_j \quad j=1,2,\dots,N, \quad (110)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla \tilde{p} + \nabla \cdot \left\{ \mu \left( \nabla V + (\nabla V)^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) \mathbf{I} \right) \right\}, \quad (111)$$

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) h = -\nabla \cdot \left( -\lambda \nabla T + \sum_{j=1}^N \rho h_j Y_j V_{D_j} \right) + \frac{\partial p_u}{\partial t}, \quad (112)$$

$$\rho = \frac{p_u M}{RT}. \quad (113)$$

Ce système d'équations doit être complété par les vitesses de diffusion, les enthalpies, les entropies, les taux de production massique, les chaleurs massiques à pression constante et les coefficients de transport.

En utilisant les relations (39) et (42), l'équation de conservation de l'énergie peut s'écrire en faisant apparaître la température  $T$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + (V \cdot \nabla) h &= \sum_{j=1}^N Y_j \left( \frac{\partial h_j}{\partial t} + (V \cdot \nabla) h_j \right) + \sum_{j=1}^N h_j \left( \frac{\partial Y_j}{\partial t} + (V \cdot \nabla) Y_j \right) \\ &= c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + (V \cdot \nabla) T \right) + \sum_{j=1}^N h_j \left( \frac{\partial Y_j}{\partial t} + (V \cdot \nabla) Y_j \right), \end{aligned} \quad (114)$$

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left( \sum_{j=1}^N \rho h_j Y_j V_{D_j} \right) &= \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{D_j} \cdot \nabla h_j + \sum_{j=1}^N h_j \nabla \cdot (\rho Y_j V_{D_j}) \\ &= \left( \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{D_j} c_{p_j} \right) \cdot \nabla T + \sum_{j=1}^N h_j \nabla \cdot (\rho Y_j V_{D_j}), \end{aligned} \quad (115)$$

en utilisant (30) on obtient l'expression suivante :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p (V \cdot \nabla) T = -\nabla \cdot (-\lambda \nabla T) - \left( \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{D_j} c_{p_j} \right) \cdot \nabla T - \sum_{j=1}^N h_j \dot{W}_j + \frac{\partial p_u}{\partial t}. \quad (116)$$

Dans l'équation (116), l'expression  $\sum_{j=1}^N h_j \dot{W}_j$  est connue sous le nom de dégagement de chaleur.

Les équations (109), (111) et (116) forment le système d'équations des flammes isobares. Dans ces équations, les inconnues sont : la vitesse, la pression, la température et les fractions massiques des espèces chimiques. Une des grandes difficultés lors de la résolution de ces équations est la détermination des fractions massiques. Pour cela, deux grandes méthodes seront examinées :

1. la première méthode consiste à considérer comme inconnues les  $(N-1)$  premières espèces et de calculer la fraction massique de la dernière espèce à l'aide de la relation suivante :

$$Y_N = 1 - \sum_{j=1}^{N-1} Y_j \quad (117)$$

Dans ce cas, seules les  $(N-1)$  premières équations de conservation des espèces chimiques sont retenues pour le calcul. Toutefois, cette méthode n'est pas toujours précise pour la fraction massique de la dernière espèce  $Y_N$  calculée par la relation (117).

Une solution à ce problème consiste à choisir généralement comme dernière espèce  $(N)$ , l'espèce qui est en excès dans la flamme. Cependant, cette méthode est moins réaliste pour les flammes de diffusion ou pour les flammes de prémélange. Elle n'est retenue que s'il s'agit d'une étude avec une cinétique chimique simple, ce qui n'est pas le cas dans ce mémoire.

2. La seconde possibilité est de considérer que toutes les fractions massiques  $Y_j$  sont inconnues. Par conséquent, la relation (118) doit être vérifiée à chaque itération du calcul.

$$\sum_{j=1}^N Y_j = 1, \quad (118)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{j=1}^N Y_j \right) + (V \cdot \nabla) \left( \sum_{j=1}^N Y_j \right) = 0. \quad (119)$$

L'équation (119) est obtenue en sommant les  $N$  équations de conservation des espèces chimiques. Ce résultat est rendu possible parce que les deux termes  $\sum_{j=1}^N Y_j V_{D_j}$  et  $\sum_{j=1}^N \dot{W}_j$  sont nuls. L'équation (119) doit vérifier l'expression (118) et cela à l'aide des conditions aux limites adoptées. Cette méthode de calcul est retenue pour la modélisation des flammes dont la cinétique chimique est très complexe, et c'est donc celle que nous utiliserons.

Le système d'équations qui régit les flammes laminaires isobares à la pression atmosphérique est le suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0, \quad (120)$$

$$\rho \frac{\partial Y_j}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) Y_j = -\nabla \cdot (\rho Y_j V_{D_j}) + \dot{W}_j \quad j=1,2,\dots,N, \quad (121)$$

$$\rho \frac{\partial V}{\partial t} + \rho (V \cdot \nabla) V = -\nabla \tilde{p} - \nabla \cdot \left\{ \mu \frac{2}{3} (\nabla \cdot V) \mathbb{I} - \mu (\nabla V + (\nabla V)^T) \right\}, \quad (122)$$



$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p (V \cdot \nabla) T = -\nabla \cdot (-\lambda \nabla T) - \left( \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{D_j} c_{p_j} \right) \cdot \nabla T - \sum_{j=1}^N h_j \dot{W}_j, \quad (123)$$

$$\rho = \frac{p_{atm} M}{RT}. \quad (124)$$

## 2.4 Flammes laminaires étirées de diffusion

Dans cette étude, nous nous intéressons exclusivement aux flammes laminaires étirées de diffusion dans un écoulement à contre courant. Ce genre de flammes est obtenu en dirigeant un jet de combustible contre un jet de comburant (*Fig.4*), ou contre un comburant vicié avec des produits de combustion (*Fig.5*). La zone qui s'établit comme une frontière entre les deux écoulements est appelée zone de réaction.

Dans ces modèles, la zone de réaction d'une flamme turbulente est décrite comme un assemblage d'éléments de surface de flamme dits "flammelettes". Ces éléments de surface de flamme sont convectés, déformés, produits et détruits par l'écoulement turbulent. Par ailleurs, les écoulements à point d'arrêt constituent une configuration naturelle et simple pour l'étude des effets d'étirement sur ce genre de flamme.

### 2.4.1 Formulation à étirement constant

Une flamme laminaire stationnaire étirée de diffusion en configuration contre courant et à point d'arrêt peut être décrite par les équations simplifiées des couches limites réactives. Pour la géométrie qui nous intéresse, nous utiliserons des solutions approchées des équations stationnaires des flammes laminaires isobares.

Les solutions trouvées seront similaires aux équations des flammes isobares et non seulement aux équations des couches limites réactives. C'est cette méthode qui sera adoptée dans la suite de ce travail. L'étude faite au cours de cette maîtrise est monodimensionnelle suivant l'axe  $(oy)$ .

Soit  $(o, x, y, z)$ , un système de coordonnées,  $y$  la coordonnée normale à la flamme et  $(y = 0)$  le plan d'arrêt (*fig.8*). Nous désignons par  $u$  et  $V$  les composantes de la vitesse suivant  $x$  et  $y$  respectivement. On cherche alors une solution similaire des équations (120) à (124) sous la forme :

$$\rho = \rho(y), \quad (125)$$

$$u = \varepsilon x U(y), \quad (126)$$

$$V = \frac{\varsigma(y)}{\rho(y)}, \quad (127)$$

$$T = T(y), \quad (128)$$

$$\tilde{p} = -\rho_e \varepsilon^2 \frac{x^2}{2} + \tilde{p}(y), \quad (129)$$

$$Y_j = Y_j(y). \quad (130)$$

$\varepsilon$  est le taux d'étirement,  $U$  est une vitesse adimensionnée qui ne dépend que de  $y$ ,  $\varsigma$  est le flux massique qui ne dépend que de  $y$  et  $\rho_e$  est la masse volumique des gaz frais.

Les expressions donnant les vitesses de diffusion et les coefficients de transport montrent que la vitesse de diffusion est une fonction de  $y$  :

$$V_{D_j} = (0, V_{D_j}(y), 0). \quad (131)$$

En introduisant les expressions (125) à (131) dans le système d'équations des flammes laminaires isobares, on aboutit à un système où les nouvelles variables inconnues sont :  $U$ ,  $\varsigma$ ,  $\rho$ ,  $T$ , et  $Y_j$   $j=1,2,\dots,N$ .

$$\frac{\partial \varsigma}{\partial y} + (1+\alpha)\rho \varepsilon U = 0, \quad (132)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial U}{\partial y} \right) - \varsigma \frac{\partial U}{\partial y} + \rho \varepsilon - \rho U^2 = 0, \quad (133)$$

$$\frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \left( \frac{\varsigma}{\rho} \right)}{\partial y} \right) - \varsigma \frac{\partial \left( \frac{\varsigma}{\rho} \right)}{\partial y} - \frac{2}{3} (1+\alpha) \varepsilon \frac{\partial (\mu U)}{\partial y} + (1+\alpha) \mu \varepsilon \frac{\partial U}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{p}}{\partial y} = 0, \quad (134)$$

$$\varsigma \frac{\partial Y_j}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} (\rho Y_j V_{D_j}) - \dot{W}_j = 0 \quad j=1,2,\dots,N, \quad (135)$$

$$\varsigma c_p \frac{\partial T}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \left( \sum_{j=1}^N \rho Y_j V_{D_j} c_{p_j} \right) \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{j=1}^N h_j \dot{W}_j = 0, \quad (136)$$

$\alpha$  est un entier qui vaut zéro si la géométrie est bidimensionnelle et un si elle est axisymétrique.

### 2.4.2 Les conditions aux limites

La fermeture du système d'équations qui régit les flammes laminaires étirées de diffusion nécessite la détermination de  $(2N+3)$  équations de fermeture. En effet, il faut déterminer deux conditions aux limites pour chaque équation d'espèces chimiques, deux pour les équations de l'énergie et de la quantité de mouvement et une pour l'équation de

conservation de la masse. Le domaine d'étude d'une flamme laminaire varie selon le cas, s'il s'agit d'une flamme de prémélange ou de diffusion. Dans le cas des flammes de diffusion, la configuration compte aussi, car on peut trouver des études à contre courant ou contre un plan. Dans le cas des études des flammes laminaires de diffusion à contre courant l'intervalle d'étude est de  $-\infty$  à  $+\infty$ .

Les conditions aux limites en  $y = -\infty$  sont :

$$T(-\infty) = T_{\text{méthane}}, \quad (137)$$

$$Y_j(-\infty) = Y_{j,-\infty} \quad j=1,2,\dots, N, \quad (138)$$

$$U(-\infty) = 1. \quad (139)$$

Les conditions aux limites en  $y = +\infty$  sont :

$$T(+\infty) = T_{\text{air}}, \quad (140)$$

$$Y_j(+\infty) = Y_{j,+\infty} \quad j=1,2,\dots, N, \quad (141)$$

$$U(+\infty) = \sqrt{\frac{\rho_{\text{méthane}}}{\rho_{\text{air}}}}. \quad (142)$$

La condition aux limites en  $y=0$  est :

$$V(0) = 0. \quad (143)$$

## 2.5 Étude numérique d'une flamme laminaire étirée

Les équations qui régissent les flammes laminaires étirées de diffusion sont tout d'abord discrétisées à l'aide d'une méthode de différences finies. La solution finale est trouvée

ensuite de manière itérative en utilisant la méthode récursive de *Newton* et *Raphson* et en réadaptant le maillage pour chaque itération.

### 2.5.1 Discrétisation

L'objectif de la méthode est d'obtenir une discrétisation des équations (133) à (137) sur le domaine  $[a, b]$ . Ce domaine sera divisé en  $M$  points de l'espace suivant le maillage  $\mathfrak{I}$  :

$$\mathfrak{I} = \{a = \xi_0 \langle \xi_1 \langle \dots \dots \langle \xi_M = b \rangle \dots \rangle \}. \quad (144)$$

Soit  $g$  une fonction de  $[a, b] \rightarrow \mathfrak{R}^I$ , et soit  $\hat{g} = (\hat{g}_1, \hat{g}_2, \dots, \hat{g}_M)^T$  le vecteur de  $\mathfrak{R}^M$  présentant l'approximation discrète de  $g$  sur le maillage  $\mathfrak{I}$ . On adopte les abréviations suivantes :  $g^i = g(\xi_i)$ ,  $\hat{g}^i = \hat{g}(\xi_i)$   $i=0, 1, \dots, M$ .

$$\left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_{\xi_i} = \partial g^i, \quad (145)$$

$$g^{i+\frac{1}{2}} = \frac{\hat{g}^i + \hat{g}^{i+\frac{1}{2}}}{2} \quad i=0, 1, \dots, M-1, \quad (146)$$

$$\partial g^{i+\frac{1}{2}} = \frac{\hat{g}^{i+1} - \hat{g}^i}{h_{i+1}} \quad i=0, 1, \dots, M-1, \quad (147)$$

$$h_i = \xi_i - \xi_{i-1}. \quad (148)$$

Les équations du système des flammes laminaires étirées sont écrites sous la forme discrétisées sur le maillage  $\mathfrak{I}$  en remplaçant les opérateurs différentiels par des différences finies. En particulier, les termes de diffusion dans l'équation de conservation des espèces

chimiques et de l'énergie sont approchés avec la méthode de différence finie dite “centrée”.

On peut représenter de façon générale cette méthode par :

$$\left. \frac{\partial}{\partial y} \left( a(y) \frac{\partial g}{\partial y} \right) \right|_{\xi_i} \equiv \left( \frac{I}{\xi_{i+1} - \xi_{i-1}} \right) \left( a^{i+\frac{1}{2}} \partial g^{i+1} - a^{i-\frac{1}{2}} \partial g^i \right), \quad (149)$$

où  $a$  est une fonction quelconque.

Pour les termes convectifs et les termes de première dérivation on utilise la méthode “upwind”. Dans ce cas, on a l'expression suivante :

$$\left. \frac{\partial g}{\partial \xi} \right|_{\xi_i} \equiv \partial g^i. \quad (150)$$

Le schéma “upwind” dépend aussi de la vitesse au point  $\xi_i$ . Si le schéma est en amont et la vitesse au point  $\xi_i$  est positive :

$$\left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_c = \partial g^{i-\frac{1}{2}}, \quad (151)$$

si le schéma est en amont et la vitesse au point  $\xi_i$  est négative :

$$\left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_c = \partial g^{i+\frac{1}{2}}, \quad (152)$$

et si le schéma est centré :

$$\left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_c = \left( \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{\xi_{i+1} - \xi_{i-1}} \right) \partial g^{i-\frac{1}{2}} + \left( \frac{\xi_i - \xi_{i-1}}{\xi_{i+1} - \xi_{i-1}} \right) \partial g^{i+\frac{1}{2}}. \quad (153)$$

En remplaçant les expressions (151) à (153) dans le système d'équations (133) à (137) on obtient :

La masse :

$$\left. \frac{\partial \varsigma}{\partial y} \right|_{i-\frac{l}{2}} + (\alpha + 1) \rho_{i-\frac{l}{2}} \varepsilon_{i-\frac{l}{2}} U_{i-\frac{l}{2}} = 0. \quad (154)$$

Les espèces :

$$\varsigma_i \left. \frac{\partial Y_j}{\partial y} \right|_c + \frac{(\rho Y_j V_{D_j})_{i+\frac{l}{2}} - (\rho Y_j V_{D_j})_{i-\frac{l}{2}}}{\xi_{i+\frac{l}{2}} - \xi_{i-\frac{l}{2}}} - \dot{W}_{j_i} = 0. \quad (155)$$

La quantité de mouvement :

$$\frac{\mu_{i+\frac{l}{2}} \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i+\frac{l}{2}} - \mu_{i-\frac{l}{2}} \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_{i-\frac{l}{2}}}{\xi_{i+\frac{l}{2}} - \xi_{i-\frac{l}{2}}} - \varsigma_i \left. \frac{\partial U}{\partial y} \right|_c + \rho_e \varepsilon_i - \rho_i U_i^2 = 0. \quad (156)$$

L'énergie :

$$\varsigma_i c_{p_i} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_c = \frac{\lambda_{i+\frac{l}{2}} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{i+\frac{l}{2}} - \lambda_{i-\frac{l}{2}} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{i-\frac{l}{2}}}{\xi_{i+\frac{l}{2}} - \xi_{i-\frac{l}{2}}} - \left( \sum_{j=1}^N h_{j_i} \dot{W}_{j_i} \right) + \rho_i \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_c (A_i - B_i c_{p_i}). \quad (157)$$

dans l'équation de l'énergie :

$$A_i = \sum_{j=1}^N \frac{M_j}{M_i} D_{ji}^H c_{p_{ji}} \left. \frac{\partial X_j}{\partial y} \right|_c - \frac{1}{T_i} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_c \sum_{j=1}^N \frac{M_j}{M_i} D_{ji}^H D_{T,ji} c_{p_{ji}}, \quad (158)$$

$$B_i = \sum_{j=1}^N \frac{M_j}{M_i} D_{ji}^H \left. \frac{\partial X_j}{\partial y} \right|_c - \frac{1}{T} \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_c \sum_{j=1}^N \frac{M_j}{M_i} D_{ji}^H D_{T,ji}. \quad (159)$$

Les conditions aux limites s'écrivent ( $i=1$ ) :

$$T_i = T_0, \quad (160)$$

$$Y_i = Y_{j_0} \quad j=1,2,\dots,N, \quad (161)$$

$$U_i = 1, \quad (162)$$

Les conditions aux limites s'écrivent ( $i=M$ ) :

$$T_i = T_0, \quad (163)$$

$$Y_i = Y_{j_0} \quad j=1,2,\dots,N, \quad (164)$$

$$U_i = \sqrt{\frac{\rho_{+\infty}}{\rho_{-\infty}}}. \quad (165)$$

Au plan d'arrêt  $y=0$  :

$$V_i(0) = 0. \quad (166)$$

### 2.5.2 La méthode de Newton

Nous avons vu que les équations des flammes étirées de diffusion se réduisent à un problème aux limites posé sur l'intervalle  $[a, b]$ . Nous pouvons écrire un tel système symboliquement sous la forme :

$$\Gamma(Z) = 0. \quad (167)$$

Dans cette notation  $Z$  est une fonction inconnue de l'intervalle  $[a, b] \rightarrow \mathfrak{R}^{L=N+3}$  et  $(L)$  est le nombre de composantes de  $Z=(T, Y_1, Y_2, \dots, Y_N, \zeta, U)$ .

$\Gamma$  est un vecteur de  $(N+1)(M+1)$  dimensions. En effet, les  $(N+1)$  premiers termes correspondent aux conditions aux limites au point  $\xi_0 = a$ . Les prochains  $(N+1)(M-1)$



termes correspondent aux termes de l'énergie, de quantité de mouvement et des espèces chimiques des nœuds  $\xi_j$ ,  $j=1,2,\dots,M-1$ , alors que les autres  $(N+1)$  termes correspondent aux conditions aux limites au point  $\xi_M = b$ .

Pour trouver une solution à ce système, on doit utiliser une solution de départ  $Z_0$  assez proche de la solution. Finalement, le système d'équation (167) peut être résolu principalement à l'aide de la méthode de *Newton* :

$$Z^{n+1} = Z^n - \lambda^n J^{-1}(Z^n) F(Z^n), \quad (168)$$

$$J(Z^n) = \frac{\partial F(Z^n)}{\partial Z}, \quad (169)$$

$$(0 < \lambda \leq 1).$$

$Z^{n+1}$  et  $Z^n$  désignent les  $(n+1)^e$  et  $(n)^e$  itérations,  $\lambda^n$  est le  $(n)^e$  paramètre de relaxation et  $J$  est une matrice jacobienne de dimension  $(N+1)(M+1) \times (N+1)(M+1)$ .

On peut montrer que cette matrice est tridiagonale par bloc, ce qui permet d'utiliser des algorithmes spécifiques qui réduisent le temps de calcul de la matrice jacobienne et de son inverse. Pour plus de détails voir *Smooke (1983)*.

En pratique, l'équation (168) s'écrit sous la forme suivante :

$$J(Z^n)(Z^{n+1} - Z^n) = -\lambda^n F(Z^n). \quad (170)$$

### 2.5.3 Remaillage du domaine de calcul

Des études récentes ont montré que les flammes laminares sont souvent le siège de forts gradients de pression et de température.

Tant du point de vue théorique qu'expérimental, l'étude des flammes de diffusion est difficile à cause du déplacement du front de flamme.

Le déplacement de la zone de réaction est dû aux variations des paramètres d'étude comme la richesse, la température d'injection des gaz frais et l'étirement. Ainsi, il est nécessaire d'adapter le maillage en maintenant un nombre suffisant de nœuds dans les régions de forts gradients et d'éviter d'en mettre trop où la solution varie peu.

La méthode utilisée est l'équidistribution d'une fonction de points  $f$  par un maillage  $\mathfrak{S}$  en fonction de la constante  $\aleph$ . La méthode est décrite dans *Smooke (1982)* :

$$\mathfrak{S} = \{a = \xi_0, \xi_1, \dots, \xi_M = b\},$$

$$\int_{\xi_i}^{\xi_{i+1}} f d\xi = \aleph \quad i=0, 1, \dots, M-1. \quad (171)$$

La fonction de points  $f$  est choisie suivant les dérivées de la fonction inconnue. Dans le calcul, la fonction  $f$  s'écrit :

$$f = \underset{1 \leq l \leq 2L+3}{\text{Max}} f^l, \quad (172)$$

$$f^1 = \ell, \quad (173)$$

$$f^{l+1} = \frac{\left| \frac{\partial Z^l}{\partial \xi} \right|}{\beta (\text{Max} Z^l - \text{Min} Z^l)} \quad 1 \leq l \leq L+1 \quad (174)$$

$$f^{l+L+2} = \frac{\left| \frac{\partial^2 Z^l}{\partial^2 \xi} \right|}{\Psi \left( \text{Max} \left( \frac{\partial Z^l}{\partial \xi} \right) - \text{Min} \left( \frac{\partial Z^l}{\partial \xi} \right) \right)} \quad 1 \leq l \leq L+1. \quad (175)$$

$\beta$  et  $\Psi$  sont comprises entre 0 et 1. Alors que  $\ell$  est défini comme un nombre réel positif.

Pour éviter que l'intervalle entre deux points successifs du maillage devienne très grand, nous imposons au programme à chaque itération de vérifier l'équation (176) :

$$\frac{1}{C} \leq \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{\xi_i - \xi_{i-1}} \leq C \quad i=1,2,\dots,M-1, \quad (176)$$

où  $C$  est une constante positive.

#### 2.5.4 Aperçu sur le calcul

Pour les calculs présentés dans ce mémoire, nous avons utilisé deux codes écrits initialement par *Smooke* pour les flammes de prémélange. Nous avons développé et réadapté le programme pour des flammes laminaires de diffusion. Les paramètres utilisés sont la température d'injection des gaz frais et l'étirement.

Les propriétés thermodynamiques et les coefficients de transport utilisés dans cette étude sont tirés des codes de calcul *CHEMKIN* et *TRANSPORT*. Dans ces routines les propriétés thermodynamiques des espèces sont déduites des chaleurs molaires à pression constante qui sont écrites sous la forme de polynômes du quatrième degré de la température sur deux intervalles d'approximation  $[T_{inf}, T_{med}]$  et  $[T_{med}, T_{sup}]$ . Ainsi, les enthalpies molaires et les entropies molaires se déduisent à partir des enthalpies de formation standard à  $0^\circ K$ .

Le code de *TRANSPORT* permet l'approximation par des polynômes du troisième degré en  $\log T$  des conductivités  $\lambda_j$ , des viscosités  $\mu_j$  et des coefficients de diffusion binaire  $D_{jk}$ .

Le code *CHEMKIN* permet l'écriture automatique des grandeurs thermochimiques et le calcul des vitesses de réaction. Le résultat final permet l'écriture du vecteur  $Z=(T, Y_1, Y_2, \dots, Y_N, U, \zeta)$  en fonction de la position axiale.

## 2.6 Conclusion

La deuxième partie a été consacrée aux équations des flammes isobares ainsi qu'à la description des approximations utilisées. En effet, les équations de bilan sont tout d'abord approximées pour les flammes laminaires à faible nombre de Mach, puis soumises aux conditions des flammes isobares étirées. Nous avons examiné les deux grandes méthodes de résolution de ces équations. La première méthode consiste à considérer comme inconnues les  $(N-1)$  premières espèces chimiques et de calculer la fraction massique de la dernière espèce par la relation (117). La seconde méthode considère que toutes les fractions massiques des espèces chimiques sont inconnues et que par conséquent la relation (118) doit être assurée. C'est cette méthode qui sera retenue pour le calcul des fractions massiques.

Le paragraphe (§2.5) a rappelé les conditions aux limites d'une flamme de diffusion ainsi que la formulation à étirement constant. Enfin, la méthode numérique de résolution de ces équations a été décrite en détails. Il s'agit d'un couplage entre la méthode de *Newton* et d'un maillage adaptatif.

Dans le chapitre qui suit, nous présentons les résultats numériques obtenus, ainsi que la discussion relative à ces derniers.

## 3

# RÉSULTATS NUMÉRIQUES

## 3.1 Mécanismes de référence

Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes intéressés aux flammes laminaires étirées de diffusion méthane-air. Nous avons utilisé deux schémas cinétiques différents pour la combustion du méthane. Le premier est à 27 espèces et 100 réactions (*annexe 2*) alors que le deuxième est à 38 espèces et 162 réactions (*annexe 3*).

Le premier mécanisme a été déjà utilisé par *M.H. Sennoun (1994)* dans une étude d'une flamme de prémélange propane air. Le schéma réactionnel de base issu de sa thèse contient 31 espèces et 123 réactions. La différence entre ce schéma et le premier mécanisme de cette étude, réside dans le fait que l'on a négligé les espèces suivantes : les deux  $C_3H_7$  (*configuration bateau et configuration chaise*),  $C_3H_8$  et  $C_3H_6$  ainsi que les 23 réactions dans lesquelles elles sont présentes.

Le deuxième schéma cinétique utilisé dans cette étude est plus détaillé que le premier mécanisme. Il tient compte des oxydes d'azote. Le schéma réactionnel de base est tiré de l'article de *Miller et Bowman (réf.33)*. Il contient 42 espèces et 236 réactions. Ce mécanisme est un schéma de base pour le propane. On a négligé alors les espèces suivantes :  $C_4H_3$ ,  $C_4H_2$ ,  $C_3H_3$  et  $C_3H_2$  ainsi que les 74 réactions dans lesquelles ces espèces

sont présentes pour arriver à un schéma cinétique complet pour le méthane. Ce schéma fournit plus d'information sur les fractions massiques des espèces chimiques.

### 3.2 Paramètres d'étude de la flamme

Le but de ce travail est d'étudier la structure fine d'une flamme laminaire étirée de diffusion méthane-air avec viciation et en configuration contre courant. La formulation utilisée est celle à étirement constant. En effet, pendant le calcul, la valeur de l'étirement a été imposée.

Les flammes que nous allons étudier sont formées en dirigeant un jet de méthane contre un jet d'air. La zone de rencontre donne une flamme de diffusion (*fig.4*), cette zone est appelée zone de réaction. Au niveau de la flammelette, on assiste à de forts gradients de température et de vitesse. Cela explique pourquoi la flamme produite est très sensible à la température d'injection des gaz frais et à l'étirement.

Les calculs présentés dans ce chapitre sont faits pour une température d'injection de méthane égale à  $332.K$  et une longueur axiale de  $7.5\text{ mm}$ . Cette longueur représente la distance entre le jet d'air et le jet de méthane. Ces deux valeurs ne changeront pas au cours de cette étude.

L'étude de la variation de la température du méthane est inutile car il est rare qu'on augmente la température du combustible. La distance entre les deux jets ne variera pas. Car si on augmente la distance entre les deux jets on augmente considérablement le temps de calcul et le nombre d'itérations nécessaire pour converger au résultat final.

Les flammes que nous allons utiliser sont presque isobares. On considérera la pression constante et égale à la pression atmosphérique dans la totalité de l'écoulement.

Comme nous l'avons mentionné précédemment, nous avons travaillé avec deux schémas cinétiques différents pour la combustion du méthane :

- Le premier schéma ne tient pas compte des oxydes d'azote et les espèces majoritaires sont :  $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$  et  $N_2$ . Les premiers calculs faits avec ce schéma servent à valider le code de calcul utilisé. Ils sont faits pour une température d'air de  $283.K$ , la température du méthane est de  $332.K$  et l'étirement est de  $100.s^{-1}$ . Les résultats obtenus seront comparés avec les travaux théoriques et expérimentaux de *Dixon-Lewis* et al (*réf.15*).
- La deuxième partie du calcul utilisera le deuxième mécanisme. Ce schéma est plus détaillé que le premier. Il contient 62 réactions et 11 espèces de plus que le premier. La majorité de ces espèces contient des atomes d'azote et d'oxygène. L'étude sert à définir l'influence de l'augmentation de la température de l'air sur la structure du front de flamme et sur la formation des oxydes d'azotes dans les produits de combustion. Ce mécanisme est utilisé pour connaître l'influence de la viciation de l'air par des produits de combustion sur la formation des oxydes d'azote.

Nous allons définir trois paramètres qui caractérisent de façon complémentaire la structure de la flamme. Ces paramètres sont la vitesse d'expansion des gaz frais  $V_E$ , la vitesse du front de la flamme  $V_F$  et la position du front de flamme  $L_E$  (*fig.9*).

### 3.3 Résultats numériques

#### 3.3.1 Schéma sans oxydes d'azote.

Les résultats qui seront présentés dans cette section sont calculés pour les conditions suivantes :

- $T_{air} = 283.K$ ,
- $V_{air} = 32.42 (cm/s)$ ,
- $T_{méthane} = 332.K$ ,
- $V_{méthane} = 25.17 (cm/s)$ ,
- $\varepsilon = 100.s^{-1}$ ,
- la distance entre les deux brûleurs est égale à 7.5mm.
- la fraction massique de l'oxygène dans l'air est égale à 0.23,
- la fraction massique de l'azote dans l'air est égale à 0.77.

Nous présenterons la température en kelvins, la vitesse en  $(cm/s)$ , les fractions massiques des espèces majoritaires :  $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $N_2$ , les fractions massiques des espèces minoritaires :  $CH_2O$ ,  $CH_3$ ,  $OH$ ,  $O$ ,  $H$ ,  $HO_2$  et les fractions massiques de quelques autres espèces :  $H_2$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ .

La figure (3.1a) présente le profil de température. Ce profil montre bien l'importance du gradient causé par la présence du front de flamme. La température maximale, notée  $T_{max}$ , est de 1956.K à la position  $L_M = 0.192 mm$  ( $L_M$  est la position axiale où la température est maximale). Cette température est une température adiabatique de fin de combustion du mélange méthane-air.



La figure (3.1b) présente le profil de vitesse axiale. La vitesse axiale d'injection de l'air est de  $32.42 \text{ (cm/s)}$ . Cette vitesse décroît graduellement jusqu'à la présence de forts gradients de température. Ces gradients donnent une expansion au gaz frais qui provoquent à leur tour une augmentation importante de la vitesse. La vitesse axiale atteint un maximum puis décroît jusqu'au point d'arrêt ( $y=0$ ) où elle s'annule. De l'autre côté, le méthane entre à une vitesse de  $25.17 \text{ (cm/s)}$ , cette vitesse décroît graduellement jusqu'à la rencontre du point d'arrêt où elle s'annule également.

Le profil de vitesse axiale présente deux pics importants : la valeur la moins élevée correspond à la vitesse du front de flamme notée  $V_F$ . Le deuxième pic correspond au maximum de la vitesse (vitesse maximale d'expansion des gaz frais). Elle est notée  $V_E$  (voir fig.9). Sur la figure (3.1b)  $V_E=51.67 \text{ cm/s}$  et  $V_F=17.55 \text{ cm/s}$ .

On peut localiser la flammelette à partir du profil de vitesse. En effet, la flammelette se retrouve entre la portion axiale de la vitesse d'expansion des gaz frais et celle de la vitesse du front de flamme, c'est à dire entre  $(0.21\text{mm}, 0.38\text{mm})$ .

La figure (3.1c) correspond aux fractions massiques des espèces majoritaires. La somme des fractions massiques en chaque point du mélange est égale à 1, ce qui vérifie l'équation (7). On remarque une baisse importante de la fraction massique du méthane et de l'oxygène. Cette diminution donne naissance au gaz carbonique et à la vapeur d'eau. Les pics du  $\text{CO}_2$  et de l' $\text{H}_2\text{O}$  correspondent à des valeurs faibles du méthane et de l'oxygène.

La figure (3.1c) est représentée à l'échelle logarithmique sur la figure (3.1d). L'azote reste constant au début de la réaction pour décroître par la suite.

La figure (3.1e) présente la fraction massique des espèces minoritaires :  $CH_2O$ ,  $CH_3$ ,  $OH$ ,  $O$ ,  $H$  et  $HO_2$ . Ces espèces apparaissent dans la zone de réaction, elles sont considérées comme des espèces intermédiaires.

D'une autre façon, on peut localiser la flammelette par l'apparition de  $OH$ . Sur la figure (3.1e), la fraction massique de  $OH$  est plus importante dans l'intervalle (0.14mm, 0.31mm). La figure (3.1f) présente la fraction massique des espèces minoritaires qui contiennent des atomes de carbone. Nous avons présenté :  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$  et  $CH_4$ . On remarque que ces espèces apparaissent loin de la zone de réaction. En effet les molécules  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$  et  $C_2H_6$  sont les premiers composés à être produits après la décomposition du méthane, donc ils apparaissent là où le pourcentage du  $CH_4$  est élevé.

Sur la figure (3.1g) on montre une comparaison entre le profil de température obtenue par la présente étude et celui de *Dixon-Lewis* et al (1984). En ce qui concerne leurs travaux, on trouve quatre courbes pour différents étirements  $100.s^{-1}$ ,  $200.s^{-1}$ ,  $300.s^{-1}$ ,  $400.s^{-1}$  et une courbe expérimentale. Cette dernière correspond à l'étirement  $100.s^{-1}$ . Nous remarquons que la valeur de la température expérimentale est moins élevée que celle du calcul théorique. En effet, les deux calculs théoriques négligent la perte de chaleur par rayonnement. Sur la même figure, on trouve une comparaison entre le profil de vitesse de la présente modélisation et celui de *Dixon-Lewis* et al (1984). Sur leur modélisation, la courbe 1 correspond à un étirement de  $100.s^{-1}$  et l'expérience est présentée par des points.

La figure (3.1h) montre une comparaison entre les deux modélisations pour les espèces majoritaires et minoritaires. À droite, on retrouve les calculs effectués dans la présente étude et à gauche ceux de *Dixon* et al (1984). Sur les travaux de *Dixon-Lewis*, l'expérience

est représentée par des symboles. On peut conclure que les deux études donnent à peu près les mêmes résultats et cela est appuyé par l'expérience.

### 3.3.1.1 Influence de l'étirement

Nous avons consacré beaucoup de temps pour déterminer l'influence de la variation de l'étirement sur la structure de la flamme. Nous avons varié l'étirement de  $85.s^{-1}$  à  $400.s^{-1}$  avec un pas de  $5.s^{-1}$  sans remarquer une grande variation de la température de fin de combustion. On souhaitait varier l'étirement de zéro jusqu'à l'extinction de la flamme. On parle d'extinction de la flamme si la température de fin de combustion varie entre  $1200.K$  et  $1400.K$ . Or les résultats obtenus n'étaient pas conformes aux prédictions. Faute de temps, il nous a été impossible de déterminer les raisons de ce comportement du modèle.

Nous nous efforçons de préciser que les résultats obtenus avec un étirement  $100.s^{-1}$  sont exacts. En effet, nous avons comparé nos quatre premiers résultats (3.1a), (3.1b), (3.1d), (3.1e) avec ceux de *Dixon-Lewis* et al (1984) et cette comparaison nous a permis de valider tous nos calculs.

### 3.3.1.2 Influence de la température d'injection de l'air

La structure de la flamme et ses propriétés dépendent de plusieurs paramètres caractéristiques. En plus de l'étirement, la température des gaz frais joue un rôle important dans la structure de la flamme, la localisation du front de flamme, la température de fin de combustion et les profils de vitesse. Dans cette section, on cherchera à connaître l'influence

de l'augmentation de la température sur la structure de la flamme. Les conditions du calcul sont :

- $T_{air} = 283.K, 400.K, 600.K, 800.K$  et  $1000.K$ ,
- $V_{air} = 32.42 (cm/s), 32.21 (cm/s), 33.28 (cm/s), 35.04 (cm/s)$  et  $37.16 (cm/s)$ ,
- $T_{méthane} = 332.K$ ,
- $V_{méthane} = 25.05 (cm/s), 20.66 (cm/s), 16.43 (cm/s), 13.93 (cm/s)$  et  $12.24 (cm/s)$ ,
- $\epsilon = 100.s^{-1}$ ,
- distance entre les deux brûleurs est égale à 7.5mm,
- la fraction massique de l'oxygène dans l'air est égale à 0.23,
- la fraction massique de l'azote dans l'air est égale à 0.77.

La figure (3.1.2a) présente les profils des températures. Dans ce calcul, on varie la température d'injection des gaz frais de 283.K à 1000.K, tout en gardant la température du méthane égale à 332.K.

On remarque que la température de fin de combustion augmente si la température d'injection de l'air augmente.

De même, on assiste à un déplacement du front de flamme vers le débit d'air. Le tableau (3.1) résume la figure (3.1.2a). Rappelons-nous que la position  $L_M$  nous donne une idée approximative sur la région de la flammelettes.

On conclut que l'augmentation de la température d'injection des gaz frais favorise l'augmentation de la température de fin de combustion.

**Tableau 3.1 : La température maximale de fin de combustion  $T_{max}$  et la position maximale  $L_M$  pour différentes température d'injection d'air.**

$T_{air}(K)$	$T_{max}(K)$	$L_M (cm)$
283.	1995.	0.192
400.	2059.	0.212
600.	2158.	0.236
800.	2246.	0.258
1000.	2327.	0.272

La figure (3.1.2b) montre les profils des vitesses axiales pour différentes températures d'air. On remarque une légère diminution de la vitesse d'expansion des gaz frais. De même, l'augmentation de la température des gaz frais favorise un accroissement de la vitesse du front de flamme ainsi qu'un déplacement de la position  $L_E$  vers le débit d'air. Cette augmentation de la vitesse de front de flamme est due à la présence de forts gradients de température.

Toutes les courbes de vitesse se croisent au point d'arrêt où la vitesse est nulle. Le tableau (3.2) donne les valeurs de  $V_F$ ,  $V_E$  et  $L_F$  pour diverses températures d'air :

**Tableau 3.2 : La vitesse du front de flamme, la vitesse d'expansion des gaz frais et la position  $L_F$  pour différentes température d'injection d'air.**

$T_{air} (K)$	$V_F (cm/s)$	$V_E (cm/s)$	$L_F (cm)$
283.	17.7	52.3	0.212
400.	22.4	50.1	0.236
600.	29.2	48.8	0.280
800.	34.1	48.7	0.315
1000.	37.1	48.6	0.345

Les figures (3.1.2c) et (3.1.2d) montrent les fractions massiques du  $CO_2$  et de l' $H_2O$  respectivement pour différentes températures d'injection d'air. On observe une légère diminution et un déplacement de la position de la fraction massique maximale de  $CO_2$  avec la température.

Les fractions massiques de  $CO_2$  et de  $H_2O$  varient entre 0.1 et 0.14 au niveau de la zone de réaction et décroissent ailleurs jusqu'à s'annuler. Ces gaz ont tendance à apparaître au niveau de la flammelette et loin des deux débits d'entrée.

La figure (3.1.2e) présente la fraction massique du  $CO$ . Son maximum passe de  $3.87.10^{-2}$  à  $6.58.10^{-2}$  si la température de l'air passe de 283.K à 1000.K. On conclut que l'augmentation de la température de l'air favorise l'apparition du  $CO$ . La même tendance est observée sur la figure (3.1.2f) pour le  $H_2$  dont la fraction massique passe de  $2.01.10^{-3}$  à  $4.07.10^{-3}$ .

La figure (3.1.2g) présente le profil des fractions massiques d'oxygène. On remarque que l'oxygène se consomme plus vite avec l'augmentation de la température des gaz frais, ce qui peut être expliqué par le déplacement de la zone de réaction vers le débit d'air.

### 3.3.2 Schéma avec oxydes d'azote.

Nous nous sommes intéressés à un schéma réactionnel qui tient compte des oxydes d'azote puisque ces gaz sont présents dans les produits de combustion de plusieurs installations industrielles. Avec les oxydes de soufre, ils sont responsables des pluies acides. Nous avons analysé l'influence de la recirculation des produits de combustion sur la réduction des oxydes d'azote. Le moyen que nous avons retenu est de vicier l'air frais qui entre en contact avec le méthane par du  $CO_2$  et de l' $H_2O$ . La partie qui suit est une étude théorique de cette approche.

Après avoir exposé dans le paragraphe précédent les résultats du premier mécanisme réactionnel (*annexe 2*), nous allons maintenant présenter pour le deuxième schéma cinétique (*annexe 3*) les mêmes profils des températures, des vitesses et des fractions massiques des espèces chimiques les plus pertinentes. Ce mécanisme contient 38 espèces et 162 réactions.

Les résultats obtenus seront comparés avec les résultats du premier mécanisme réactionnel pour les mêmes conditions de calcul qu'auparavant. L'étude vise à mesurer l'importance d'un schéma cinétique détaillé.

La figure (3.2a) présente les profils des températures pour les deux schémas cinétiques. On remarque, pour le mécanisme 2, une légère augmentation de la température de fin de

combustion et un léger déplacement de la position  $L_M$  vers le débit d'air. La figure (3.2b) présente la vitesse axiale en fonction de la position axiale. On y note une petite augmentation de la vitesse d'expansion des gaz frais ainsi qu'un déplacement de la position  $L_E$ . On conclut que si le schéma cinétique est détaillé, la position de la flammelette est connue avec plus de précision.

Les figures (3.2c) et (3.2d) présentent les fractions massiques de  $CO_2$  et de  $H_2O$  respectivement. On peut constater que la fraction massique de  $H_2O$  diminue de façon générale si le schéma cinétique est plus détaillé, alors que c'est l'inverse pour le dioxyde de carbone.

Sur la figure (3.2e) on retrouve la fraction massique de l'oxygène en fonction de la position axiale. L'oxygène se consomme plus vite lorsque le mécanisme réactionnel est plus détaillé, ce qui se manifeste par un léger déplacement de la zone de réaction. La figure (3.2f) présente la fraction massique du méthane. Le calcul montre qu'il n'y a pas une grande différence entre les résultats des deux mécanismes.

Les figures (3.2g) et (3.2h) présentent les fractions massiques des oxydes d'azote  $NO$  et  $NO_2$  calculées avec le deuxième mécanisme. On se rappellera que le premier schéma cinétique ne tient pas compte de ces composés. Les oxydes d'azote représentent 0.0097% des produits de combustion dégagés si la température d'injection de l'air frais est égale à 283.K alors que leur concentration monte à 0.06% si la température d'injection des gaz frais est de 1000.K. Les pourcentages précédents sont calculés pour une température d'injection de méthane égale à 332.K.



Les fractions massiques des espèces  $N_2O$ ,  $CO$ ,  $OH$ ,  $H_2$ ,  $CH$ ,  $CH_2O$  et  $CH_2$  sont présentées aux figures (3.2i) à (3.2o) pour les deux schémas cinétiques.

Le tableau (3.3) présente le maximum des fractions massiques ainsi que leurs positions axiales correspondantes.

**Tableau 3.3 : Comparaison entre les fractions massiques maximales de quelques espèces chimiques pour les deux schémas cinétiques.**

	1 <sup>er</sup> schéma réactionnel		2 <sup>ème</sup> schéma réactionnel	
	$Y_M$	$L(cm)$	$Y_M$	$L(cm)$
$NO$			$8.87 e^{-5}$	0.221
$NO_2$			$4.75 e^{-6}$	0.330
$N_2O$			$6.41 e^{-7}$	0.265
$CO$	$3.87 e^{-2}$	0.178	$4.35 e^{-2}$	0.167
$OH$	$3.72 e^{-3}$	0.221	$3.68 e^{-3}$	0.231
$H_2$	$2.01 e^{-3}$	0.152	$1.52 e^{-3}$	0.162
$CH$	$9.08 e^{-6}$	0.197	$2.28 e^{-6}$	0.202
$CH_2O$	$1.88 e^{-4}$	0.192	$3.03 e^{-4}$	0.197
$CH_2$	$6.62 e^{-5}$	0.192	$9.93 e^{-5}$	0.197

Le tableau (3.4) présente l'erreur de calcul sur les fractions massiques maximales si on décide de réduire le schéma cinétique utilisé. L'erreur est calculée par rapport au deuxième mécanisme réactionnel que l'on considère le plus précis.

$$erreur = \left| \frac{Y^{(1)} - Y^{(2)}}{Y^{(2)}} \right|$$

**Tableau 3.4 : L'erreur de calcul sur les fractions massiques maximales.**

	$NO$	$NO_2$	$N_2O$	$CO$	$OH$	$H_2$	$CH$	$CH_2$	$CH_2O$
l'erreur calculée				0.11	0.01	0.32	2.98	0.33	0.37

$Y^{(1)}$  : est la fraction massique de l'espèce chimique calculée par le premier mécanisme.

$Y^{(2)}$  : est la fraction massique de l'espèce chimique calculée par le deuxième mécanisme.

L'allure des courbes obtenues ainsi que les erreurs calculées sur les valeurs maximales nous amènent à conclure que la réduction du schéma cinétique conduit à une perte d'information, parfois significative, sur les températures, les vitesses et les fractions massiques des diverses espèces chimiques.

### 3.3.2.1 Influence de la température d'injection de l'air

Après avoir donnée, à la section précédente, la comparaison entre les deux schémas cinétiques, nous avons remarqué qu'il n'y a pas une grande différence entre les profils des températures, des vitesses et des fractions massiques des espèces majoritaires. C'est pourquoi dans ce qui suit, nous donnerons seulement les profils des fractions massiques des espèces suivantes :  $N$ ,  $NO$ ,  $NO_2$  et  $N_2O$ .

Les conditions de calculs seront les mêmes que celles utilisées dans le calcul précédent.

La figure (3.2.1a) correspond à la fraction massique de  $N$ . Celle-ci est donnée en fonction de la position axiale pour différente température d'air. Ces températures varient entre  $283.K$  et  $1000.K$ . La figure (3.2.1a) nous indique que l'atome  $N$  est favorisé par l'augmentation de la température de l'air et que le maximum de la fraction massique se déplace vers le coté du débit d'air.

Les figures (3.2.1b) et (3.2.1c) correspondent aux fractions massiques de  $NO$  et de  $NO_2$ . On en déduit que l'augmentation de la température de l'air favorise l'accroissement de la fraction massique de  $NO$  et défavorise de façon générale l'espèce  $NO_2$ . On remarque aussi sur les deux figures un déplacement de la zone de réaction vers le débit d'air.

La figure (3.2.1d) correspond au profil de  $N_2O$ . Ce profil présente deux pics, qui pourraient être dus à la présence de la molécule  $N_2O$  dans plusieurs réactions chimiques avec de grandes énergies d'activations

**Tableau 3.5 : La fraction massique de quelques espèces chimiques présentées pour deux températures d'air.**

	$T_{air} = 283.K$	$T_{air} = 1000.K$
$N$	$1.88 e^{-7}$	$1.66 e^{-6}$
$NO$	$8.97 e^{-5}$	$5.95 e^{-4}$
$NO_2$	$4.75 e^{-6}$	$6.22 e^{-7}$
$N_2O$	$6.41 e^{-7}$	$8.10 e^{-7}$

Le tableau (3.5) donne le maximum de ces fractions massiques pour différentes températures d'air.

### 3.3.2.2 Influence de la viciation

La structure du front de flamme, les températures de fin de combustion et les fractions massiques des espèces chimiques dépendent de plusieurs paramètres. Nous venons de voir que la structure et la position de la flammelette dépend de la cinétique chimique utilisée.

Cette partie de l'étude, à laquelle nous avons consacré beaucoup de temps, met en évidence l'influence de la viciation de l'air par des produits de combustion sur la formation et la structure de la flamme.

En effet, dans un four de combustion, la flamme produite est généralement en écoulement turbulent, ce qui favorise la création de zones de récirculation des produits de combustion.

Comme le montre la figure 10 une partie de l'air frais entre en contact avec une zone de recirculation produisant ainsi une viciation du comburant.

On suppose que l'air utilisé pour la combustion du méthane contient des produits de combustion ( $CO_2$  et  $H_2O$ ) en proportion égales. Ainsi, l'air frais sera composé d'azote, d'oxygène, de gaz carbonique et de vapeur d'eau.

Nous avons varié la fraction massique de l'oxygène de 0.23 à 0 avec un pas de 0.2 et nous nous contenterons d'étudier des flammes dont la température d'injection de gaz frais est égale à 1000.K.

Les conditions initiales de calcul pour une fraction massique d'oxygène égale à 0.23 sont :

- $T_{air} = 1000.K,$
- $V_{air} = 37.16 (cm/s),$
- $T_{méthane} = 332.K,$
- $V_{air} = 12.24 (cm/s),$

- $\varepsilon = 100.s^{-1}$ ,
- la fraction massique de l'azote dans l'air frais est égale à 0.77,
- la fraction massique de l'oxygène dans l'air frais varie de 0.23 à 0,
- les fractions massiques des gaz de combustion ( $CO_2$  et  $H_2O$ ) dans l'air frais sont égales

$$\text{à : } Y_{H_2O} = Y_{CO_2} = \frac{1 - Y_{N_2} - Y_{O_2}}{2}.$$

Les figures (3.2.2a) à (3.2.2g) montrent une comparaison des profils des températures, des vitesses axiales et des fractions massiques de différentes espèces chimiques :  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $N_2O$ ,  $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$  et  $H_2O$ .

La figure (3.2.2a) est une comparaison des profils de températures obtenus. On remarque que la température décroît si l'air est vicié. Ce phénomène est dû aux faibles pourcentages d'oxygène dans l'air. Le tableau (3.6) donne la valeur de la température de fin de combustion et la vitesse d'expansion des gaz frais pour différents pourcentages d'oxygène dans l'air.

**Tableau 3.6 : La température maximale et la vitesse d'expansion pour différentes cas de viciation.**

	$T_{max} (K)$	$V_E (cm/s)$
$Y_{O_2} = 0.23$	2341.	48.9
$Y_{O_2} = 0.20$	2236.	47.5
$Y_{O_2} = 0.14$	1943.	44.4
$Y_{O_2} = 0.10$	1631.	41.6

La figure (3.2.2b) présente le profil de vitesse en fonction de la position axiale. Sur cette figure on voit que la vitesse d'expansion des gaz frais diminue si le pourcentage de l'oxygène dans l'air diminue. On remarque qu'il n'y a pas de vitesse de front de flamme pour certaines courbes car l'élévation de la température de l'air favorise la combustion du méthane. Sur toutes les figures la vitesse est nulle au point d'arrêt  $V(y=0)=0$ .

La figure (3.2.2c) présente la fraction massique de  $CO_2$  pour différents pourcentages d'oxygène dans l'air. La fraction massique du dioxyde de carbone augmente si l'air est plus vicié. Une diminution du pourcentage d'oxygène à l'entrée signifie qu'il y a augmentation des quantités de  $CO_2$  et d' $H_2O$  injectées artificiellement. Toutefois, une telle augmentation des produits de combustion à l'entrée se traduit par des températures de fin de combustion plus faibles (figure (3.2.2a)), donc en principe par une production plus faible du  $CO_2$  par la combustion. Les deux effets se compensent presque rigoureusement pour les fractions  $Y_{O_2}=0.16$  et  $0.10$ . Cette tendance n'est pas observée toutefois pour les fractions  $Y_{O_2}=0.23$  et  $0.20$ .

La figure (3.2.2d) représente la fraction massique de  $CO$ . On peut constater que cette dernière diminue avec l'augmentation de la viciation par les produits de combustion. La diminution de la température causée par la viciation défavorise la formation de  $CO$  de façon très significative ; en effet on note une diminution appréciable du  $CO$  alors que la concentration de  $CO_2$  augmente.

Le  $CO$  apparaît au niveau de la zone de réaction et loin des deux entrées. La figure (3.2.2e) présente la fraction massique de  $OH$ , celle-ci diminue logiquement si l'air est vicié, ce radical étant la signature de la zone de réaction.

Le tableau (3.7) indique les fractions massiques de  $NO$  et  $NO_2$  pour différentes fractions d'oxygène. Les profils de ces deux espèces sont présentés aux figures (3.2.2f) et (3.3.2g). La viciation de l'air par des produits de combustion entraîne une diminution du  $NO$  et du  $NO_2$ , suite à une diminution de la température.

**Tableau 3.7 : La fraction massique maximale de  $NO$  et  $NO_2$  pour différents cas de viciation.**

$O_2$ (fraction)	$NO$ (fraction)	$NO_2$ (fraction)
0.23	$5.95 e^{-4}$	$6.22 e^{-7}$
0.18	$3.31 e^{-4}$	$5.99 e^{-7}$
0.14	$4.70 e^{-5}$	$7.93 e^{-8}$
0.10	$3.22 e^{-6}$	$2.41 e^{-8}$

La dernière figure présentée dans cette partie est le profil de la fraction massique de  $N_2O$ . Sur la figure (3.3.2h), le premier pic représente une réaction favorisée à base température. Ce maximum diminue si l'air est plus vicié.

### 3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés aux flammes laminaires étirées de diffusion méthane-air. Nous avons utilisé la formulation dite à étirement constant et deux schémas cinétiques différents pour la combustion du méthane. La différence entre les deux schémas cinétiques, c'est que le deuxième mécanisme tient compte des oxydes d'azotes. Le paragraphe (§3.3.1) expose les résultats obtenus avec le premier schéma cinétique

(annexe2). On y trouve les profils de température, de vitesse et des fractions massiques de plusieurs espèces chimiques. La partie (§3.3.1.2) traite l'influence de la température d'injection de l'air sur la structure de la flamme. Plusieurs espèces chimiques ont été étudiées ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $H_2$  et  $O_2$ ). Le profil de température de fin de combustion pour différentes températures d'injection des gaz frais et la vitesse axiale ont été donnés. Le tableau (3.1) donne, pour différentes températures d'air frais, la position de la température maximale de fin de combustion.

La partie (§3.3.2) traite le schéma avec des oxydes d'azotes. On fait une comparaison entre les valeurs des fractions massiques pour les deux schémas cinétiques. Les espèces chimiques ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$ ,  $CH_4$ ,  $OH$ ,  $CO$ ,  $H_2$ ,  $CH$ ,  $CH_2O$  et  $CH_2$ ) sont analysées et annexées dans ce mémoire, en plus du profil de température de fin de combustion et de la vitesse axiale. Le tableau (3.3) résume une partie de ces calculs.

Le paragraphe (§3.3.2.1) est consacré à l'étude de l'influence de l'augmentation de la température de l'air sur la formation des oxydes d'azotes. Nous avons remarqué que la température d'injection de l'air frais influence les fractions massiques de  $N$ ,  $NO$ ,  $NO_2$  et  $N_2O$ .

Finalement, la partie (§3.3.2.2) traite de la viciation de l'air par des produits de combustion. La formation et le pourcentage des oxydes d'azotes dans l'air ont été étudiés. Nous avons varié la fraction massique de l'oxygène dans l'air frais de 0.23 à 0. Nous avons donné comme résultats la température de fin de combustion, la vitesse et les fractions massiques de  $CO_2$ ,  $CO$ ,  $OH$ ,  $NO$ ,  $NO_2$  et  $N_2O$ .



## 4

# CONCLUSION

Dans ce travail, consacré à la modélisation numérique d'une flamme de diffusion méthane-air, la formulation dite à étirement constant a été étudiée. Cette formulation est la meilleure approche pour modéliser les flammes étirées intervenant dans les modèles de combustion turbulente basés sur le concept des flammelettes laminaires.

Cette formulation nous a permis d'étudier l'influence de la température d'injection des gaz frais, l'étirement et la viciation par des produits de combustion sur la structure des flammes. Cette formulation ne permet pas d'imposer la vitesse d'injection des gaz frais. Toutefois, il existe une deuxième approche : la formulation dite à vitesse imposée. Cette dernière permet une comparaison entre la théorie et l'expérience. Cette formulation n'est pas étudiée dans ce mémoire.

Après avoir exposé les résultats obtenus avec deux schémas cinétiques, on conclut qu'il est plus utile et plus avantageux d'utiliser un schéma réactionnel détaillé qui tient compte de toutes les espèces chimiques.

Nous avons remarqué que les deux schémas cinétiques donnent le même ordre de grandeur pour les vitesses et les températures. Par contre, l'ordre de grandeur n'est pas le même pour les fractions massiques de toutes les espèces chimiques.

Pour le premier mécanisme réactionnel utilisé, l'augmentation de la température de l'air entraîne :

- une augmentation de la température de fin de combustion,
- une diminution de la vitesse d'expansion des gaz frais, ainsi qu'un déplacement de la flammelette vers la source d'air (*tableau 3.1*),
- une augmentation de la vitesse du front de flamme (voir : figure 9 pour la définition de la vitesse du front de flamme).
- une augmentation de la fraction massique de  $CO$ ,  $H_2O$  et de  $H_2$  et une diminution de  $CO_2$ .

Pour le deuxième schéma cinétique utilisé, nous avons effectué deux calculs : le premier nous a permis de déterminer l'influence de l'augmentation de la température de l'air sur la formation des oxydes d'azote. On rappelle que les espèces  $NO$ ,  $NO_2$  et  $N_2O$  n'étaient pas incluses dans le premier mécanisme. On conclut que l'augmentation de la température de l'air entraîne :

- une augmentation de la fraction massique de  $NO$  et de  $N_2O$ ,
- une diminution de la fraction massique de  $NO_2$ .

Le deuxième calcul visait à étudier l'influence de la viciation de l'air par les produits de combustion sur la formation des oxydes d'azote. Nous avons remarqué :

- une baisse de la température de fin de combustion et de la vitesse d'expansion des gaz frais,
- une diminution des oxydes d'azote ( $NO$ ,  $NO_2$ ) dans les produits de combustion.

Cette étude a donné des résultats théoriques intéressants. Il resterait maintenant à procéder à une phase expérimentale pour valider ces résultats ou bien étudier la formulation dite à vitesse imposée. Toutefois, le couplage entre le modèle local qui est étudié dans ce mémoire, et le modèle global est une bonne continuité pour la modélisation de la combustion turbulente.

## *Annexe 1*

Cette partie expose la méthode de calcul de la vitesse de diffusion thermique qui est obtenue par une méthode basée sur l'analyse du mouvement des molécules. Ce développement est dû à *F.A. Williams (1965)*.

Considérons la diffusion de l'espèce  $j$  dans un milieu constitué d'espèce  $k$ . Nous définissons la masse réduite des espèces  $j$  et  $k$  par :

$$M_{jk} = \frac{M_j M_k}{M_j + M_k}, \quad (1)$$

$M_j$  et  $M_k$  sont les masses des espèces  $j$  et  $k$  respectivement. La variation microscopique de la quantité de mouvement des molécules du type  $j$  s'écrit :

$$\sum_{k=1}^N M_{jk} \gamma_{jk} (V_{D_k} - V_{D_j}) + \rho_j f_j. \quad (2)$$

Le paramètre  $\rho_j$  présente la masse volumique de l'espèce  $j$ ,  $\gamma_{jk}$  est le nombre de collisions entre les molécules  $j$  et  $k$  par unité de volume et par seconde.  $f_j$  est la force qui agit sur les molécules  $j$ .  $V_{D_j}$  et  $V_{D_k}$  sont les vitesses de diffusion thermique des espèces  $j$  et  $k$  respectivement. D'un point de vue macroscopique la variation de l'équation (2) s'écrit :

$$\rho_j \frac{dV}{dt} + \nabla p_j, \quad (3)$$

$V$  est la vitesse moyenne de l'écoulement réactif et  $p_j$  la pression partielle de l'espèce  $j$ .

En admettant la même température de translation pour toutes les molécules, on obtient d'après la loi de Dalton " $p_j = X_j p$ " la relation suivante :

$$\nabla p_j = p \nabla X_j + X_j \nabla p. \quad (4)$$

En prenant comme tenseur de pression la pression  $p$ , la conservation de quantité de mouvement pour le fluide s'écrit :

$$\rho \frac{dV}{dt} = -\nabla p + \sum_{k=1}^N \rho_k f_k, \quad (5)$$

$\rho$  est la masse volumique du fluide et  $p$  sa pression. On éliminant le terme  $\frac{dV}{dt}$  des

équations (2) et (4) et on utilisant l'équation (3) on trouve :

$$\sum_{k=1}^N M_{jk} \gamma_{jk} (V_{D_k} - V_{D_j}) + (Y_j - X_j) \nabla p - p \nabla X_j + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^N \rho_j \rho_k (f_j - f_k) = 0. \quad (6)$$

Une analyse plus complète tenant compte d'une diffusion due au gradient de température conduit à la relation suivante :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N M_{jk} \gamma_{jk} (V_{D_k} - V_{D_j}) + (Y_j - X_j) \nabla p - p \nabla X_j + \frac{1}{\rho} \sum_{k=1}^N \rho_j \rho_k (f_j - f_k) \\ + \sum_{k=1}^N \left[ \frac{R X_j X_k}{M D_{jk}} \left( \frac{D_{T,k}}{Y_k} - \frac{D_{T,j}}{Y_j} \right) \right] \nabla T = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

$D_{T,j}$  et  $D_{T,k}$  sont les coefficients de diffusion thermique et  $D_{jk}$  le coefficient de diffusion

binaire. Le nombre des collisions s'exprime par la relation :

$$\gamma_{jk} = \frac{X_j X_k p}{M_{jk} D_{jk}}. \quad (8)$$

Si on utilise (7) et (8) on obtient l'équation suivant :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \frac{X_j X_k}{D_{jk}} (V_{D_k} - V_{D_j}) &= \nabla X_j + (X_j - Y_j) \frac{\nabla p}{p} + \frac{\rho}{p} \sum_{k=1}^N Y_j Y_k (f_k - f_j) \\ &+ \sum_{k=1}^N \frac{X_j X_k}{\rho D_{jk}} \left( \frac{D_{T,j}}{Y_j} - \frac{D_{T,k}}{Y_k} \right) \frac{\nabla T}{T}, \end{aligned} \quad (9)$$

l'équation (9) est de rang  $(N-1)$ . Pour résoudre le système il faut ajouter une autre équation qui'est l'équation de conservation de la masse totale (10) :

$$\sum_{j=1}^N Y_j V_{D_j} = 0. \quad (10)$$

Pour déterminer d'une manière précise et unique les vitesses de diffusion, il faut intervenir le système linéaire (9) et (10). Le calcul fournit l'expression suivante :

$$V_{D_j} = \frac{1}{X_j M} \sum_{k=1}^N M_k D_{jk}^m L_j - \frac{D_{T,j}}{\rho Y_j} \frac{\nabla T}{T}, \quad (11)$$

avec

$$L_j = \nabla X_j + (X_j - Y_j) \frac{\nabla p}{p} + \frac{\rho}{p} \sum_{m=1}^N Y_j Y_m (f_m - f_j). \quad (12)$$

Où  $D_{jk}^m$  sont des coefficients de diffusion multicomposants. Ces coefficients n'ont pas d'expressions simples et faciles à utiliser. Donc, il est plus simple de trouver une approximation à la relation (11). L'idée est d'exprimer la vitesse de diffusion  $V_{D_j}$  comme la somme de deux vitesses  $\vartheta_j$  et  $\omega_j$ .

$$V_{D_j} = \vartheta_j + \omega_j, \quad (13)$$

$$\vartheta_j = \frac{1}{MX_j} \sum_{k=1}^N M_k D_{jk}^m L_k, \quad (14)$$

$$\omega_j = -\frac{\rho D_{T,j}}{Y_j} \frac{\nabla T}{T}. \quad (15)$$

Les expressions (10) et (13) amènent à :

$$\sum_{j=1}^N \vartheta_j Y_j = 0, \quad (16)$$

$$\sum_{j=1}^N \omega_j Y_j = 0. \quad (17)$$

Plusieurs études ont montré (réf.13) et (réf.40) qu'il est plus avantageux de diviser les vitesses  $\vartheta_j$  et  $\omega_j$  en deux parties :

$$\vartheta_j = \vartheta'_j + \vartheta_{cor}, \quad (18)$$

$$\omega_j = \omega'_j + \omega_{cor}. \quad (19)$$

La vitesse  $\vartheta'_j$  est une solution approchée de l'équation (14) :

$$\vartheta'_j = -D_j^H \frac{1}{X_j} L_j, \quad (20)$$

la vitesse de correction  $\vartheta_{cor}$  est déduite à partir de l'équation (16) :

$$\vartheta_{cor} = -\sum_{j=1}^N Y_j \vartheta'_j. \quad (21)$$

La vitesse  $\omega'_j$  est une solution approchée de l'équation (15) :

$$\omega'_j = \frac{D_j^H D_{T,j}}{X_j} \frac{\nabla T}{T}. \quad (22)$$

Alors que la vitesse de correction  $\omega_{cor}$  assure l'expression (17) :

$$\omega_{cor} = - \sum_{j=1}^N Y_j \omega'_j. \quad (23)$$

Il est clair maintenant que l'expression de la vitesse de diffusion  $V_{D_j}$  s'écrit :

$$V_{D_j} = -D_j^H \frac{L_j}{X_j} + \frac{D_j^H D_{T,j}}{X_j} \frac{\nabla T}{T} - \sum_{k=1}^N Y_k \left[ -D_k^H \frac{1}{X_k} L_k + \frac{D_k^H D_{T,k}}{X_k} \frac{\nabla T}{T} \right]. \quad (24)$$

Pour simplifier l'expression (24) *Hirschfelder (réf.21)* a fait l'approximation suivante :

$$L_j = \nabla X_j, \quad (25)$$

en remplaçant (25) dans (24) on trouve la valeur simplifiée de la vitesse de diffusion :

$$V_{D_j} = -D_j^H \frac{\nabla X_j}{X_j} + \frac{D_j^H D_{T,j}}{X_j} \frac{\nabla T}{T} - \sum_{k=1}^N Y_k \left[ -D_k^H \frac{1}{X_k} \nabla X_k + \frac{D_k^H D_{T,k}}{X_k} \frac{\nabla T}{T} \right].$$



## *Annexe 2*

### *Le Premier Mécanisme Réactionnel*

Les 27 espèces présentes dans le premier schéma cinétique

\*\*\*\*\*

<i>CH<sub>4</sub></i>	<i>CH<sub>3</sub></i>	<i>CO</i>	<i>HCO</i>	<i>CH<sub>2</sub>O</i>
<i>CO<sub>2</sub></i>	<i>H<sub>2</sub>O</i>	<i>CH</i>	<i>CH<sub>2</sub></i>	<i>CH<sub>2</sub>CO</i>
<i>CH<sub>3</sub>CO</i>	<i>CH<sub>3</sub>HCO</i>	<i>C<sub>2</sub>H</i>	<i>C<sub>2</sub>HO</i>	<i>C<sub>2</sub>H<sub>2</sub></i>
<i>C<sub>2</sub>H<sub>6</sub></i>	<i>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub></i>	<i>C<sub>2</sub>H<sub>3</sub></i>	<i>C<sub>2</sub>H<sub>5</sub></i>	<i>O<sub>2</sub></i>
<i>O</i>	<i>H</i>	<i>OH</i>	<i>HO<sub>2</sub></i>	<i>H<sub>2</sub>O<sub>2</sub></i>
<i>H<sub>2</sub></i>	<i>N<sub>2</sub></i>			

\*\*\*\*\*

### Mécanisme METHANE-AIR\* (1<sup>er</sup> mécanisme)

La Vitesse de réaction est sous la forme :  $K_f = \beta T^\alpha \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$ .

Les unités sont :mole, centimètre cube, seconde, Kelvin et cal/Mole

REACTIONS	$\beta$	$\alpha$	E
1. O2+H=OH+O	2.000E14	0.0	16820.
2. H2+O=OH+H	5.060E04	2.67	6290.
3. H2+OH=H2O+H	1.000E08	1.6	3300.
4. OH+OH=H2O+O	1.500E09	1.14	100.
5. H+H+M=H2+M	1.800E18	-1.0	0.
6. H+OH+M=H2O+M	2.200E22	-2.0	0.
7. O+O+M=O2+M	2.900E17	-1.0	0.
8. H+O2+M=HO2+M	2.300E18	-0.8	0.
9. HO2+H=OH+OH	1.500E14	0.0	1000.
10. HO2+H=H2+O2	2.500E13	0.0	690.
11. HO2+H=H2O+O	3.000E13	0.0	1720.
12. HO2+O=OH+O2	1.800E13	0.0	-400.
13. HO2+OH=H2O+O2	6.000E13	0.0	0.
14. HO2+HO2-H2O2+O2	2.500E11	0.0	-1240.
15. OH+OH+M=H2O2+M	3.256E22	-2.0	0.
16. H2O2+H=H2+HO2	1.700E12	0.0	3750.
17. H2O2+H=H2O+OH	1.000E13	0.0	3590.
18. H2O2+O=OH+HO2	2.800E13	0.0	6410.
19. H2O2+OH=H2O+HO2	5.400E12	0.0	1000.
20. CO+OH=CO2+H	4.400E06	1.5	-740.
21. CO+HO2=CO2+OH	1.500E14	0.0	23610.
22. CO+O+M=CO2+M	7.100E13	0.0	-4545.
23. CO+O2=CO2+O	2.500E12	0.0	47850.
24. CH+O=CO+H	4.000E13	0.0	0.
25. CH+O2=HCO+O	3.000E13	0.0	0.
26. CH+CO2-HCO+CO	3.400E12	0.0	690.
27. HCO+H=CO+H2	2.000E14	0.0	0.
28. HCO+O=CO+OH	3.000E13	0.0	0.
29. HCO+O=CO2+H	3.000E13	0.0	0.
30. HCO+OH=CO+H2O	1.000E14	0.0	0.

\* Sennoun, M.H. (1994)

REACTIONS	$\beta$	$\alpha$	E
31. <chem>HCO+O2=CO+HO2</chem>	3.000E12	0.0	0.
32. <chem>HCO+M=CO+H+M</chem>	7.100E14	0.0	16820.
33. <chem>CH2+H=CH+H2</chem>	4.000E13	0.0	0.
34. <chem>CH2+O-CO+H+H</chem>	8.000E13	0.0	0.
35. <chem>CH2+O2-CO+OH+H</chem>	6.500E12	0.0	1500.
36. <chem>CH2+O2-CO2+H+H</chem>	6.500E12	0.0	1500.
37. <chem>CH2O+H=HCO+H2</chem>	2.500E13	0.0	4000.
38. <chem>CH2O+O=HCO+OH</chem>	3.500E13	0.0	3490.
39. <chem>CH2O+OH=HCO+H2O</chem>	3.000E13	0.0	1200.
40. <chem>CH2O+HO2=HCO+H2O2</chem>	1.000E12	0.0	8000.
41. <chem>CH2O+CH3=HCO+CH4</chem>	1.000E11	0.0	6100.
42. <chem>CH2O+M=HCO+H+M</chem>	1.400E17	0.0	76550.
43. <chem>CH3+H=CH2+H2</chem>	1.800E14	0.0	15070.
44. <chem>CH3+O=CH2O+H</chem>	7.000E13	0.0	0.
45. <chem>CH3+O2-CH2O+H+O</chem>	1.500E13	0.0	28710.
46. <chem>CH3+CH3=C2H6</chem>	7.470E52	-11.9	19190.
47. <chem>CH3+M=CH2+H+M</chem>	1.000E16	0.0	90910.
48. <chem>CH3+CH3-C2H4+H2</chem>	1.000E16	0.0	32060.
49. <chem>CH3+CH2-C2H4+H</chem>	4.000E13	0.0	0.
50. <chem>CH4+H=H2+CH3</chem>	2.200E04	3.0	8760.
51. <chem>CH4+O=OH+CH3</chem>	1.200E07	2.1	7630.
52. <chem>CH4+OH=H2O+CH3</chem>	1.600E06	2.1	2460.
53. <chem>CH4+HO2=H2O2+CH3</chem>	4.000E12	0.0	19425.
54. <chem>CH4=CH3+H</chem>	3.200E34	-6.0	109450.
55. <chem>CH4+CH2=CH3+CH3</chem>	1.300E13	0.0	9545.
56. <chem>CH4+CH=C2H4+H</chem>	3.000E13	0.0	-400.
57. <chem>C2H+O=CO+CH</chem>	1.000E13	0.0	0.
58. <chem>C2H+H2=C2H2+H</chem>	1.100E13	0.0	2870.
59. <chem>C2H+O2=C2HO+O</chem>	5.000E13	0.0	1500.
60. <chem>C2HO+H=CH2+CO</chem>	3.000E13	0.0	0.
61. <chem>C2HO+O-CO+CO+H</chem>	1.000E14	0.0	0.
62. <chem>C2H2+O=CH2+CO</chem>	4.100E08	1.5	1700.
63. <chem>C2H2+O=C2HO+H</chem>	4.300E14	0.0	12130.
64. <chem>C2H2+OH=H2O+C2H</chem>	1.000E13	0.0	7000.
65. <chem>C2H2+M=C2H+H+M</chem>	3.600E16	0.0	106700.
66. <chem>CH2CO+H=CH3+CO</chem>	7.000E12	0.0	3000.
67. <chem>CH2CO+O=HCO+HCO</chem>	1.800E12	0.0	1340.
68. <chem>CH2CO+OH=CH2O+HCO</chem>	1.000E13	0.0	0.
69. <chem>CH2CO+M=CH2+CO+M</chem>	1.000E16	0.0	59330.

REACTIONS	$\beta$	$\alpha$	E
70. C2H3+H=H2+C2H2	2.000E13	0.0	0.
71. C2H3+O=CH2CO+H	3.000E13	0.0	0.
72. C2H3+O2-CH2O+HCO	1.500E12	0.0	0.
73. C2H3=C2H2+H	1.600E32	-5.5	46290.
74. CH3CO+H=CH2CO+H2	2.000E13	0.0	0.
75. CH3CO+O=CH3+CO2	2.000E13	0.0	0.
76. CH3CO+CH3=C2H6+CO	5.000E13	0.0	0.
77. CH3CO=CH3+CO	2.300E26	-5.0	17990.
78. C2H4+H=C2H3+H2	1.500E14	0.0	10215.
79. C2H4+O-CH3CO+H	1.600E09	1.2	740.
80. C2H4+OH=C2H3+H2O	3.000E13	0.0	3000.
81. C2H4+CH3=C2H3+CH4	4.200E11	0.0	11120.
82. C2H4+M=C2H2+H2+M	2.500E17	0.0	76500.
83. CH3HCO+H=CH3CO+H2	4.000E13	0.0	4210.
84. CH3HCO+O=CH3CO+OH	5.000E12	0.0	1790.
85. CH3HCO+OH=CH3CO+H2O	8.000E12	0.0	0.
86. CH3HCO+HO2=CH3CO+H2O2	1.700E12	0.0	10720.
87. CH3HCO+CH2=CH3CO+CH3	2.500E12	0.0	3800.
88. CH3HCO+CH3=CH3CO+CH4	8.500E10	0.0	6000.
89. CH3HCO=CH3+HCO	2.000E15	0.0	79190.
90. C2H5+H=CH3+CH3	3.000E13	0.0	0.
91. C2H5+O=CH3HCO+H	5.000E13	0.0	0.
92. C2H5+O2=HO2+C2H4	2.000E12	0.0	5000.
93. C2H5+C2H5=C2H4+C2H6	1.400E12	0.0	0.
94. C2H5=C2H4+H	1.300E19	-2.0	41480.
95. C2H6+H=H2+C2H5	5.400E02	3.5	5215.
96. C2H6+O=OH+C2H5	3.000E07	2.0	5120.
97. C2H6+OH=H2O+C2H5	6.300E06	2.0	645.
98. C2H6+HO2=H2O2+C2H5	6.000E12	0.0	19420.
99. C2H6+CH3=C2H5+CH4	5.500E-01	4.0	8300.
100. C2H6+CH2=CH3+C2H5	2.200E13	0.0	8680.

Le coefficient d'efficacité pour M :  
 $\alpha$  (O<sub>2</sub>)=0.4,  $\alpha$  (N<sub>2</sub>)=0.4,  $\alpha$  (CO)=0.75,  $\alpha$  (CO<sub>2</sub>)=1.5,  
 $\alpha$  (H<sub>2</sub>O)=6.5,  $\alpha$  (CH<sub>4</sub>)=3.,  $\alpha$  (H<sub>2</sub>)=1.

## *Annexe 3*

### *Deuxième mécanisme réactionnel*

Les 37 espèces présentes dans le schéma cinétique

\*\*\*\*\*

<i>CH<sub>4</sub></i>	<i>CH<sub>3</sub></i>	<i>CH<sub>2</sub></i>	<i>CH</i>	<i>CH<sub>2</sub>O</i>
<i>HCO</i>	<i>CO<sub>2</sub></i>	<i>CO</i>	<i>H<sub>2</sub></i>	<i>H</i>
<i>O<sub>2</sub></i>	<i>O</i>	<i>OH</i>	<i>HO<sub>2</sub></i>	<i>H<sub>2</sub>O<sub>2</sub></i>
<i>H<sub>2</sub>O</i>	<i>N<sub>2</sub></i>	<i>N</i>	<i>NO</i>	<i>NO<sub>2</sub></i>
<i>N<sub>2</sub>O</i>	<i>NH</i>	<i>NH<sub>2</sub></i>	<i>NH<sub>3</sub></i>	<i>NNH</i>
<i>HNO</i>	<i>NCO</i>	<i>HCN</i>	<i>CN</i>	<i>C</i>
<i>HNCO</i>	<i>HOCN</i>	<i>H<sub>2</sub>CN</i>	<i>CH<sub>3</sub>O</i>	<i>CH<sub>2</sub>CO</i>
<i>HCCO</i>	<i>C<sub>2</sub>N<sub>2</sub></i>			

\*\*\*\*\*

### **Mécanisme METHANE-AIR\* (2<sup>ème</sup> mécanisme)**

La vitesse de réaction est sous la forme :  $K_f = \beta T^\alpha \exp\left(\frac{E}{RT}\right)$ ,

Les unités sont mole, centimètre cube, seconde, Kelvin et cal/Mole

Réactions	$\beta$	$\alpha$	E
2. CH <sub>3</sub> +H+M=CH <sub>4</sub> +M	0.800E+27	-3.0000	0.0
3. CH <sub>4</sub> +O <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> +HO <sub>2</sub>	0.790E+14	0.	56000.0
4. CH <sub>4</sub> +H=CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub>	0.220E+05	3.0000	8750.0
5. CH <sub>4</sub> +OH=H <sub>2</sub> O+CH <sub>3</sub>	0.160E+07	2.1000	2460.0
5a. CH <sub>4</sub> +O=OH+CH <sub>3</sub>	0.102E+10	1.5000	8604.0
6. CH <sub>4</sub> +HO <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> +H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	0.180E+12	0.	18700.0
7. CH <sub>3</sub> +HO <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> O+OH	0.200E+14	0.	0.0
8. CH <sub>3</sub> +O <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> O+O	0.600E+18	-1.5700	29229.0
9. CH <sub>3</sub> +O=CH <sub>2</sub> O+H	0.800E+14	0.	0.0
11. CH <sub>3</sub> O+H=CH <sub>3</sub> +OH	0.100E+15	0.	0.0
12. CH <sub>3</sub> +OH=CH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub> O	0.750E+07	2.0000	5000.0
13. CH <sub>3</sub> +H=CH <sub>2</sub> +H <sub>2</sub>	0.900E+14	0.	15100.0
14. CH <sub>3</sub> O+M=CH <sub>2</sub> O+H+M	0.100E+15	0.	25000.0
16. CH <sub>3</sub> O+H=CH <sub>2</sub> O+H <sub>2</sub>	0.200E+14	0.	0.0
18. CH <sub>3</sub> O+OH=CH <sub>2</sub> O+H <sub>2</sub> O	0.100E+14	0.	0.0
20. CH <sub>3</sub> O+O=CH <sub>2</sub> O+OH	0.100E+14	0.	0.0
22. CH <sub>3</sub> O+O <sub>2</sub> =CH <sub>2</sub> O+HO <sub>2</sub>	0.630E+11	0.	2600.0
24. CH <sub>2</sub> +H=CH+H <sub>2</sub>	0.100E+19	-1.5600	0.0
25. CH <sub>2</sub> +OH=CH+H <sub>2</sub> O	0.113E+08	2.0000	3000.0
26. CH <sub>2</sub> +OH=CH <sub>2</sub> O+H	0.250E+14	0.	0.0
27. CH+O <sub>2</sub> =HCO+O	0.330E+14	0.	0.0
28. CH+O=CO+H	0.570E+14	0.	0.0
29. CH+OH=HCO+H	0.300E+14	0.	0.0
30. CH+CO <sub>2</sub> =HCO+CO	0.340E+13	0.	690.0
31. CH+H=C+H <sub>2</sub>	0.150E+15	0.	0.0
32. CH+H <sub>2</sub> O=CH <sub>2</sub> O+H	0.117E+16	-0.75000	0.0

\* Miller, J.A. and Bowman C.T., (1989)

Réactions	$\beta$	$\alpha$	E
33. CH+CH2O=CH2CO+H	0.946E+14	0.	-515.0
38. C+O2=CO+O	0.200E+14	0.	0.0
39. C+OH=CO+H	0.500E+14	0.	0.0
42. CH2+CO2=CH2O+CO	0.110E+12	0.	1000.0
43. CH2+O=CO+H+H	0.500E+14	0.	0.0
44. CH2+O=CO+H2	0.300E+14	0.	0.0
45. CH2+O2=CO2+H+H	0.160E+13	0.	1000.0
46. CH2+O2=CH2O+O	0.500E+14	0.	9000.0
47. CH2+O2=CO2+H2	0.690E+12	0.	500.0
48. CH2+O2=CO+H2O	0.190E+11	0.	-1000.0
49. CH2+O2=CO+OH+H	0.860E+11	0.	-500.0
50. CH2+O2=HCO+OH	0.430E+11	0.	-500.0
51. CH2O+OH=HCO+H2O	0.343E+10	1.1800	-447.0
52. CH2O+H=HCO+H2	0.219E+09	1.7700	3000.0
53. CH2O+M=HCO+H+M	0.331E+17	0.	81000.0
54. CH2O+O=HCO+OH	0.180E+14	0.	3080.0
55. HCO+OH=CO+H2O	0.100E+15	0.	0.0
56. HCO+M=CO+H+M	0.250E+15	0.	16802.0
57. HCO+H=CO+H2	0.119E+14	0.25000	0.0
58. HCO+O=CO+OH	0.300E+14	0.	0.0
59. HCO+O=CO2+H	0.300E+14	0.	0.0
60. HCO+O2=CO+HO2	0.330E+14	-0.40000	0.0
61. CO+O+M=CO2+M	0.617E+15	0.	3000.0
62. CO+OH=CO2+H	0.151E+08	1.3000	-758.0
63. CO+O2=CO2+O	0.160E+14	0.	41000.0
64. HO2+CO=CO2+OH	0.580E+14	0.	22934.0
93. CH2CO+O=CO2+CH2	0.175E+13	0.	1350.0
94. CH2CO+H=CO+CH3	0.113E+14	0.	3428.0
95. CH2CO+H=HCCO+H2	0.500E+14	0.	8000.0
96. CH2CO+O=HCCO+OH	0.100E+14	0.	8000.0
97. CH2CO+OH=HCCO+H2O	0.750E+13	0.	2000.0
98. CH2CO+M=CH2+CO+M	0.360E+16	0.	59270.0
102. O+HCCO=H+CO+CO	0.100E+15	0.	0.0
103. O2+HCCO=OH+CO+CO	0.160E+13	0.	854.0
130. H2+O2=2OH	0.170E+14	0.	47780.0
131. OH+H2=H2O+H	0.117E+10	1.3000	3626.0
132. O+OH=O2+H	0.400E+15	-0.50000	0.0
133. O+H2=OH+H	0.506E+05	2.6700	6290.0

Réactions	$\beta$	$\alpha$	E
134. $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	0.361E+18	-0.72000	0.0
135. $\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	0.750E+13	0.	0.0
136. $\text{H} + \text{HO}_2 = 2\text{OH}$	0.140E+15	0.	1073.0
137. $\text{O} + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{OH}$	0.140E+14	0.	1073.0
138. $2\text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	0.600E+09	1.3000	0.0
139. $\text{H} + \text{H} + \text{M} = \text{H}_2 + \text{M}$	0.100E+19	-1.0000	0.0
140. $\text{H} + \text{H} + \text{H}_2 = \text{H}_2 + \text{H}_2$	0.920E+17	-0.60000	0.0
141. $\text{H} + \text{H} + \text{H}_2\text{O} = \text{H}_2 + \text{H}_2\text{O}$	0.600E+20	-1.2500	0.0
142. $\text{H} + \text{H} + \text{CO}_2 = \text{H}_2 + \text{CO}_2$	0.549E+21	-2.0000	0.0
143. $\text{H} + \text{OH} + \text{M} = \text{H}_2\text{O} + \text{M}$	0.160E+23	-2.0000	0.0
144. $\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH} + \text{M}$	0.620E+17	-0.60000	0.0
145. $2\text{O} + \text{M} = \text{O}_2 + \text{M}$	0.189E+14	0.	-1788.0
146. $\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$	0.125E+14	0.	0.0
147. $\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	0.200E+13	0.	0.0
148. $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{M} = \text{OH} + \text{OH} + \text{M}$	0.130E+18	0.	45500.0
149. $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	0.160E+13	0.	3800.0
150. $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	0.100E+14	0.	1800.0
151. $\text{CH} + \text{N}_2 = \text{HCN} + \text{N}$	0.300E+12	0.	13600.0
152. $\text{CN} + \text{N} = \text{C} + \text{N}_2$	0.104E+16	-0.50000	0.0
153. $\text{CH}_2 + \text{N}_2 = \text{HCN} + \text{NH}$	0.100E+14	0.	74000.0
154. $\text{H}_2\text{CN} + \text{N} = \text{N}_2 + \text{CH}_2$	0.200E+14	0.	0.0
155. $\text{H}_2\text{CN} + \text{M} = \text{HCN} + \text{H} + \text{M}$	0.300E+15	0.	22000.0
156. $\text{C} + \text{NO} = \text{CN} + \text{O}$	0.660E+14	0.	0.0
157. $\text{CH} + \text{NO} = \text{HCN} + \text{O}$	0.110E+15	0.	0.0
158. $\text{CH}_2 + \text{NO} = \text{HCNO} + \text{H}$	0.139E+13	0.	-1100.0
159. $\text{CH}_3 + \text{NO} = \text{HCN} + \text{H}_2\text{O}$	0.100E+12	0.	15000.0
160. $\text{CH}_3 + \text{NO} = \text{H}_2\text{CN} + \text{OH}$	0.100E+12	0.	15000.0
161. $\text{HCCO} + \text{NO} = \text{HCNO} + \text{CO}$	0.200E+14	0.	0.0
162. $\text{HCNO} + \text{H} = \text{HCN} + \text{OH}$	0.100E+15	0.	12000.0
163. $\text{CH}_2 + \text{N} = \text{HCN} + \text{H}$	0.500E+14	0.	0.0
164. $\text{CH} + \text{N} = \text{CN} + \text{H}$	0.130E+14	0.	0.0
165. $\text{CO}_2 + \text{N} = \text{NO} + \text{CO}$	0.190E+12	0.	3400.0
166. $\text{HCCO} + \text{N} = \text{HCN} + \text{CO}$	0.500E+14	0.	0.0
167. $\text{CH}_3 + \text{N} = \text{H}_2\text{CN} + \text{H}$	0.300E+14	0.	0.0
168. $\text{HCN} + \text{OH} = \text{CN} + \text{H}_2\text{O}$	0.145E+14	0.	10929.0
171. $\text{OH} + \text{HCN} = \text{HOCN} + \text{H}$	0.585E+05	2.4000	12500.0
172. $\text{OH} + \text{HCN} = \text{HNCO} + \text{H}$	0.198E-02	4.0000	1000.0
173. $\text{OH} + \text{HCN} = \text{NH}_2 + \text{CO}$	0.783E-03	4.0000	4000.0



Réactions	$\beta$	$\alpha$	E
174. <chem>HOCN+H=HNCO+H</chem>	0.100E+14	0.	0.0
175. <chem>HCN+O=NCO+H</chem>	0.138E+05	2.6400	4980.0
176. <chem>HCN+O=NH+CO</chem>	0.345E+04	2.6400	4980.0
177. <chem>HCN+O=CN+OH</chem>	0.270E+10	1.5800	26600.0
178. <chem>CN+H2=HCN+H</chem>	0.295E+06	2.4500	2237.0
179. <chem>CN+O=CO+N</chem>	0.180E+14	0.	0.0
180. <chem>CN+O2=NCO+O</chem>	0.560E+13	0.	0.0
181. <chem>CN+OH=NCO+H</chem>	0.600E+14	0.	0.0
182. <chem>CN+HCN=C2N2+H</chem>	0.200E+14	0.	0.0
183. <chem>CN+NO2=NCO+NO</chem>	0.300E+14	0.	0.0
184. <chem>CN+N2O=NCO+N2</chem>	0.100E+14	0.	0.0
185. <chem>C2N2+O=NCO+CN</chem>	0.457E+13	0.	8880.0
186. <chem>C2N2+OH=HOCN+CN</chem>	0.186E+12	0.	2900.0
187. <chem>HO2+NO=NO2+OH</chem>	0.211E+13	0.	-479.0
188. <chem>NO2+H=NO+OH</chem>	0.350E+15	0.	1500.0
189. <chem>NO2+O=NO+O2</chem>	0.100E+14	0.	600.0
190. <chem>NO2+M=NO+O+M</chem>	0.110E+17	0.	66000.0
191. <chem>NCO+H=NH+CO</chem>	0.500E+14	0.	0.0
192. <chem>NCO+O=NO+CO</chem>	0.200E+14	0.	0.0
193. <chem>NCO+N=N2+CO</chem>	0.200E+14	0.	0.0
194. <chem>NCO+OH=NO+CO+H</chem>	0.100E+14	0.	0.0
195. <chem>NCO+M=N+CO+M</chem>	0.310E+17	-0.50000	48000.0
196. <chem>NCO+NO=N2O+CO</chem>	0.100E+14	0.	-390.0
197. <chem>NCO+H2=HNCO+H</chem>	0.858E+13	0.	9000.0
198. <chem>HNCO+H=NH2+CO</chem>	0.200E+14	0.	3000.0
199. <chem>NH+O2=HNO+O</chem>	0.100E+14	0.	12000.0
200. <chem>NH+O2=NO+OH</chem>	0.760E+11	0.	1530.0
201. <chem>NH+NO=N2O+H</chem>	0.240E+16	-0.80000	0.0
202. <chem>N2O+OH=N2+HO2</chem>	0.200E+13	0.	10000.0
203. <chem>N2O+H=N2+OH</chem>	0.760E+14	0.	15200.0
204. <chem>N2O+M=N2+O+M</chem>	0.160E+15	0.	51600.0
205. <chem>N2O+O=N2+O2</chem>	0.100E+15	0.	28200.0
206. <chem>N2O+O=NO+NO</chem>	0.100E+15	0.	28200.0
207. <chem>NH+OH=HNO+H</chem>	0.200E+14	0.	0.0
208. <chem>NH+OH=N+H2O</chem>	0.500E+12	0.50000	2000.0
209. <chem>NH+N=N2+H</chem>	0.300E+14	0.	0.0
210. <chem>NH+H=N+H2</chem>	0.100E+15	0.	0.0
211. <chem>NH2+O=HNO+H</chem>	0.663E+15	-0.50000	0.0

Réactions	$\beta$	$\alpha$	E
212. <chem>NH2+O=NH+OH</chem>	0.675E+13	0.	0.0
213. <chem>NH2+OH=NH+H2O</chem>	0.400E+07	2.0000	1000.0
214. <chem>NH2+H=NH+H2</chem>	0.692E+14	0.	3650.0
215. <chem>NH2+NO=NNH+OH</chem>	0.640E+16	-1.2500	0.0
216. <chem>NH2+NO=N2+H2O</chem>	0.620E+16	-1.2500	0.0
217. <chem>NH3+OH=NH2+H2O</chem>	0.204E+07	2.0400	566.0
218. <chem>NH3+H=NH2+H2</chem>	0.636E+06	2.3900	10171.0
219. <chem>NH3+O=NH2+OH</chem>	0.210E+14	0.	9000.0
220. <chem>NNH=N2+H</chem>	0.100E+05	0.	0.0
221. <chem>NNH+NO=N2+HNO</chem>	0.500E+14	0.	0.0
222. <chem>NNH+H=N2+H2</chem>	0.100E+15	0.	0.0
223. <chem>NNH+OH=N2+H2O</chem>	0.500E+14	0.	0.0
224. <chem>NNH+NH2=N2+NH3</chem>	0.500E+14	0.	0.0
225. <chem>NNH+NH=N2+NH2</chem>	0.500E+14	0.	0.0
226. <chem>NNH+O=N2O+H</chem>	0.100E+15	0.	0.0
227. <chem>HNO+M=H+NO+M</chem>	0.150E+17	0	48680.0
228. <chem>HNO+OH=NO+H2O</chem>	0.360E+14	0.	0.0
229. <chem>HNO+H=H2+NO</chem>	0.500E+13	0.	0.0
230. <chem>HNO+NH2=NH3+NO</chem>	0.200E+14	0.	1000.0
231. <chem>N+NO=N2+O</chem>	0.327E+13	0.30000	0.0
232. <chem>N+O2=NO+O</chem>	0.640E+10	1.0000	6280.0
233. <chem>N+OH=NO+H</chem>	0.380E+14	0.	0.0

Le coefficient d'efficacité pour M :  
 $\alpha(\text{O}_2)=2.$ ,  $\alpha(\text{N}_2)=1.3$ ,  $\alpha(\text{CO})=2.$ ,  $\alpha(\text{CO}_2)=3.$ ,  
 $\alpha(\text{H}_2\text{O})=5.$ ,  $\alpha(\text{CH}_4)=2.8$ ,  $\alpha(\text{H}_2)=2.$

## Références

- 1 Axelbaum, R.L., Law, C.K. and Flower, W.L. (1988) - " Preferential diffusion and concentration modification in sooting counterflow diffusion flames." 22<sup>nd</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 379-386.
- 2 Barrère, M. and Prud'homme, R. (1973) - " Les équations fondamentales de l'aérothermochimie." Masson et C<sup>ie</sup>, Éditeurs Paris.
- 3 Bray, K.N.C. (1986) - " Methods of including realistic chemical reaction mechanisms in turbulent combustion models." 2<sup>nd</sup> Workshop on Modelling Chemical Reaction Systems, Heidelberg. *Springer Verlag*
- 4 Bray, K.N.C., Libby, P.A. and Moss, J.B. (1984) - " Flamelet crossing frequencies and mean reaction rates in premixed turbulent combustion." *Combustion Science and Technology*, 41, pp. 143
- 5 Bradley, J.N. (1969) - " Flame and combustion phenomena." Distributed in U.S.A by Barnes and Noble, Inc.
- 6 Buckmaster, J. (1982) - " The quenching of a deflagration wave held in front of a bluff body." 17<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 835-842.
- 7 Clavin, P. and Joulin, G. (1983) - " Premixed flames in large scale and high intensity turbulent flows." *Journal de Physique. Lettres*, L1. L12

- 8 Clavin, P and Williams, F.A. (1982) - “ Effects of molecular diffusion and thermal expansion on the structure and dynamics of premixed flames in turbulent flows of large scale and low intensity.” *Journal of Fluid Mechanics*, **116**, pp. 215
- 9 Clavin, P. (1985) – “ Dynamical behaviour of premixed flame fronts in laminar and turbulent flow.” *Progress in Energy and Combustion science*, **11**, pp. 1
- 10 Coffee, T.P. and Heimerl, J.M. (1981) – “ Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames.” *Combustion and Flame*, **43**, pp. 273-289.
- 11 Darabiha, N. (1992) – “ Transient behaviour of laminar counterflow hydrogen-air diffusion flames with complex chemistry.” *Combustion Science and Technology* **86**, pp. 163
- 12 Djavdan, E., Darabiha, N., Giovangigli, V. and Candel, S. (1991) – “ Stained propane-air flames with detailed and reduced kinetic schemes.” *Combustion Science and Technology*, **76**, pp. 287
- 13 Djavdan, E. (1990) ``Étude numérique et expérimentale d'une flamme étirée de Propane-air.`` Thèse de Doctorat, École centrale Paris.
- 14 Dixon-Lewis, G. and Missaghi, M. (1988) – “ Structure and extinction limits of counterflow diffusion flame of hydrogen-nitrogen mixtures in air.” *22<sup>nd</sup> Symposium (International) on Combustion*. pp. 1461-1470.
- 15 Dixon-Lewis G., David, T., Haskell, P.H., Fukutani, S., Jinno, H., Miller, J.A., Smooke, M.D., Peters, N., Effelsberg, E., Warnatz, J. and Behrendt, F. (1983) – “ Calculation of the structure and extinction limit of methane-air counterflow

- diffusion flame in the Forward stagnation region of a porous cylinder.” 20<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 1893-1904.
- 16 Fendell, F.E. (1972) – “ Asymptotic analysis of premixed burning with large activation energy.” Journal of Fluid Mechanics, **56**, pp. 81-95
  - 17 Fendell, F.E. (1965) – “ Ignition and extinction in combustion of initially unmixed reactants.” Journal Fluid Mechanics, **21**, pp. 281
  - 18 Giovangigli, V. and Smooke, M.D. (1986) – “ Calculation of extinction limits for premixed laminar in a stagnation point flow.” Journal of Computational Physics, **68**, pp. 111
  - 19 Giovangigli, V. (1988) – “ Structure et extinction des flammes laminaires prémélangées.” Thèse de Doctorat, Université P. et M. Curie Paris.
  - 20 Gordon, S. and McBride B.J., (1971) - “ Computer Program for calculation of complex chemical equilibrium compactions, Rocket performance, Incident and reflected shocks and Chapman – Jouguet detonations ” *NASA SP-273*.
  - 21 Hirschfelder, J.O., Curtiss C.F. and Bird R.B. (1954) – “ Molecular theory of gases and liquids.” John Wiley, New York.
  - 22 Ishizuka, S. and Law, C.K. (1982) – “ An experimental study on extinction and stability of stretched premixed flames.” 19<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion, pp. 327
  - 23 Kee, R.J., Miller, J.A. and Jefferson, T.H. (1980) – “ A general-purpose transportable Fortran chemical kinetics code package.” Sandia National Laboratories, *SAND80-8003*

- 24 Kee, R.J., Warnatz, J. and Miller, J.A. (1983) – “ A Fortran computer code package for the evaluation of gas-phase viscosities and diffusion coefficients.” Sandia National Laboratories, *SAND83-8209*
- 25 Kee, R.J., Miller, J.A., Evans, G.H. and Dixon-Lewis, G. (1988) - “A computational model of the structure and extinction of strained, opposed flow, premixed methane-air flames.” *22<sup>nd</sup> Symposium (International) on Combustion*. pp. 1479.
- 26 Law, C.K. Zhu, D.L. and Yu, G. (1986) - “ Propagation and extinction of stretched premixed flames.” *21<sup>st</sup> Symposium (International) on Combustion*. pp. 1419.
- 27 Libby, P.A. and Williams, F.A. (1982) – “ Structure of laminar flamelets in premixed turbulent flames.” *Combustion and Flame*, **44**, pp. 287-303
- 28 Libby, P.A. and Williams, F.A. (1983) – “ Strained premixed laminar flames under nonadiabatic conditions.” *Combustion Science and Technology*, **31**, pp. 1-42
- 29 Libby, P.A. et Williams, F.A. (1984) – “ Strained premixed laminar flames with two reaction zones.” *Combustion Science and Technology*, **37**, pp. 221-252
- 30 Liew, S.K., Bray, K.N.C. and Moss, J.B. (1984) – “ A stretched laminar flamelet model of turbulent non-premixed combustion.” *Combustion and Flame*, **56**, pp. 199
- 31 Linan, A. (1974) – “ The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies.” *Acta Astronautica*, **1**, pp. 1007
- 32 Mir, A., Spenlehaber, B. (1984) - “ Cours et travaux dirigés de physique.” Sochepress, Casablanca.

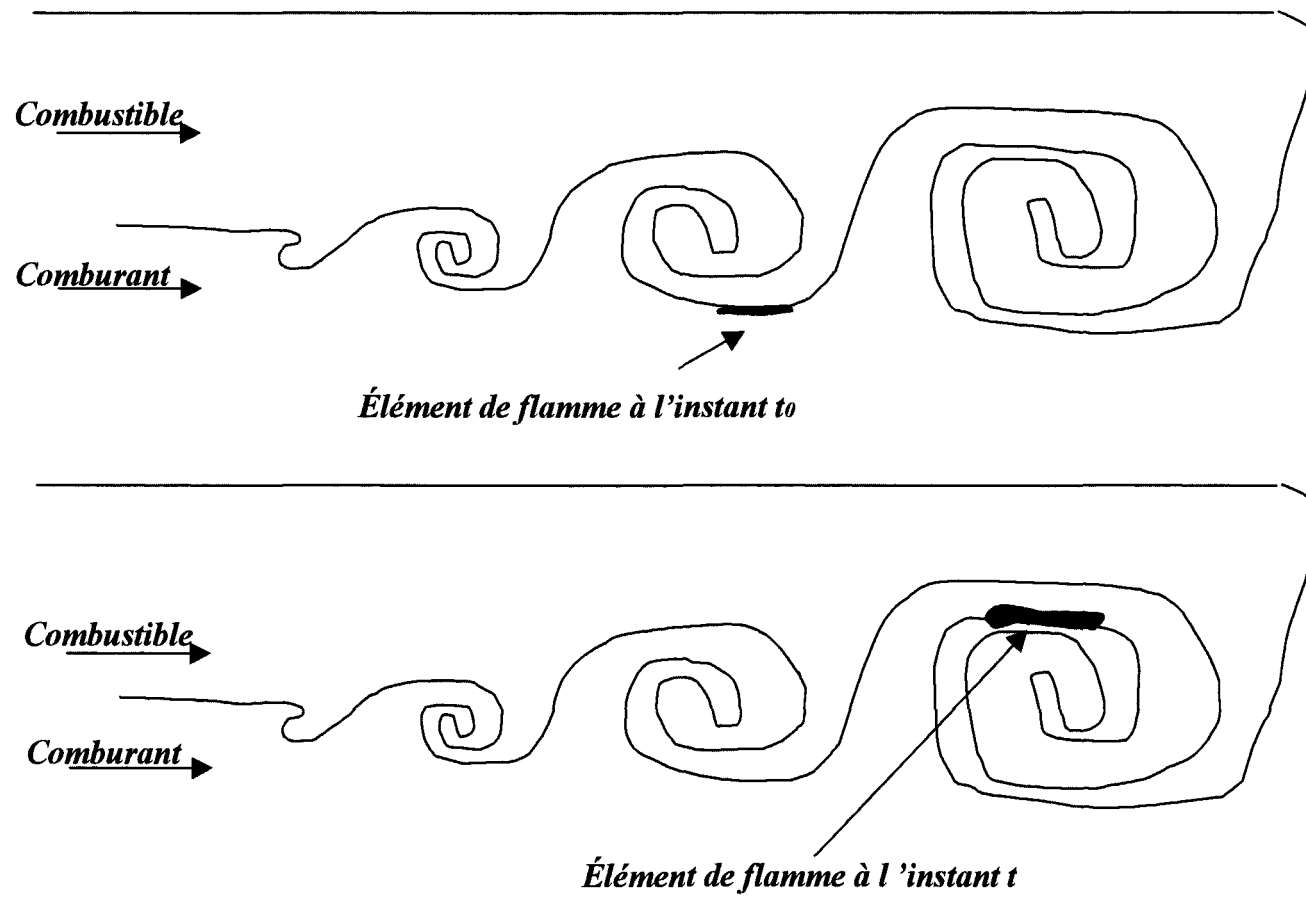
- 33 Miller, J.A. and Bowman C.T., (1989) – “ Mechanism and modelling of nitrogen chemistry in combustion.” Programme Energy Combustion Science. Volume *15*, pp. 287-338.
- 34 Marble, F. E and Broadwell, J.E (1977) – “ The coherent flame model for turbulent chemical reaction, technical report.” TRW-9-PU Project Squid Headquarters, Chafed Hall. Purdue university, West Lafayette, Indiana
- 35 Pacsko, G., Lefdal, P.M. and Peters, N. (1986) – “ Reduced reaction schemes for methane, methanol and propane flames.” *21<sup>st</sup> Symposium (International) on Combustion*, pp. 739
- 36 Peters, N. (1985) – “ Numerical and asymptotic on a analysis on a systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames.” Numerical Simulation of Combustion Phenomena, Berlin, *Springer Verlag*
- 37 Peters, N. (1986) – “ Laminar flamelet concepts in turbulent combustion.” *21<sup>st</sup> Symposium (International) on Combustion*, pp. 1231
- 38 Peters, N. and Kee, R.J. (1987) – “ The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism.” *Combustion and Flame*, *68*, pp. 17
- 39 Rogg, B. (1988) – “ Numerical analysis of two-dimensional axisymmetric, laminar jet diffusion flames.” Mathematical modelling in combustion and Related Topics, pp. 551-560
- 40 Rolon, J.C. (1988) – “ Étude théorique et expérimentale de la flamme de diffusion à contre courant.” Thèse de Doctorat, École centrale Paris.

- 41 Rolon, J.C., Veynante, D., Jacob, G. and Martin, J.P. (1987) - “ Computer controlled Laser Doppler velocimetry measurements in a flat counterflow diffusion flame.” Proceedings of an International Specialists Meeting on the use computers in Laser Velocimetry, I.S.L., St Louis, France
- 42 Rolon, J.C. and Jacob, G. (1989) – “ Extinction limits of propane-air and hydrogen-air counterflow diffusion flames.” French and British section of the Combustion Institute, Rouen, France
- 43 Sennoun, M.H. (1994) – “ Étude numérique et expérimentale de flamme laminaires étirées de prémélange propane air.” Thèse de Doctorat, école centrale Paris.
- 44 Seshadri, K. and Peters, N. (1988) – “ Asymptotic structure and extinction of methane-air diffusion flames.” Combustion and Flame, **73**, pp. 23-44
- 45 Smooke, M.D., Miller, J.A. and Kee, R.J. (1983) – “ Determination of adiabatic flame speeds by boundary value methods.” Combustion Science and Technology, **34**, pp. 79-89.
- 46 Smooke, M.D. (1982) – “ Solution of burner-stabilized laminar flames by boundary value methods.” Journal of Computational Physics, **48**, pp. 72-105.
- 47 Surugue, J. et Barrere, M. (1963) – “ Combustion.” Library Polytechnic Ch. Béranger.
- 48 Spalding, D. B. (1961) – “ Theory of mixing and chemical reaction in the opposed jet diffusion flame.” ARS J., **3**, pp. 763.
- 49 Thien, J.H. and Matalon, M. (1991) – “ on the burning velocity of stretched flames.” Combustion and Flame, **84**, pp. 238



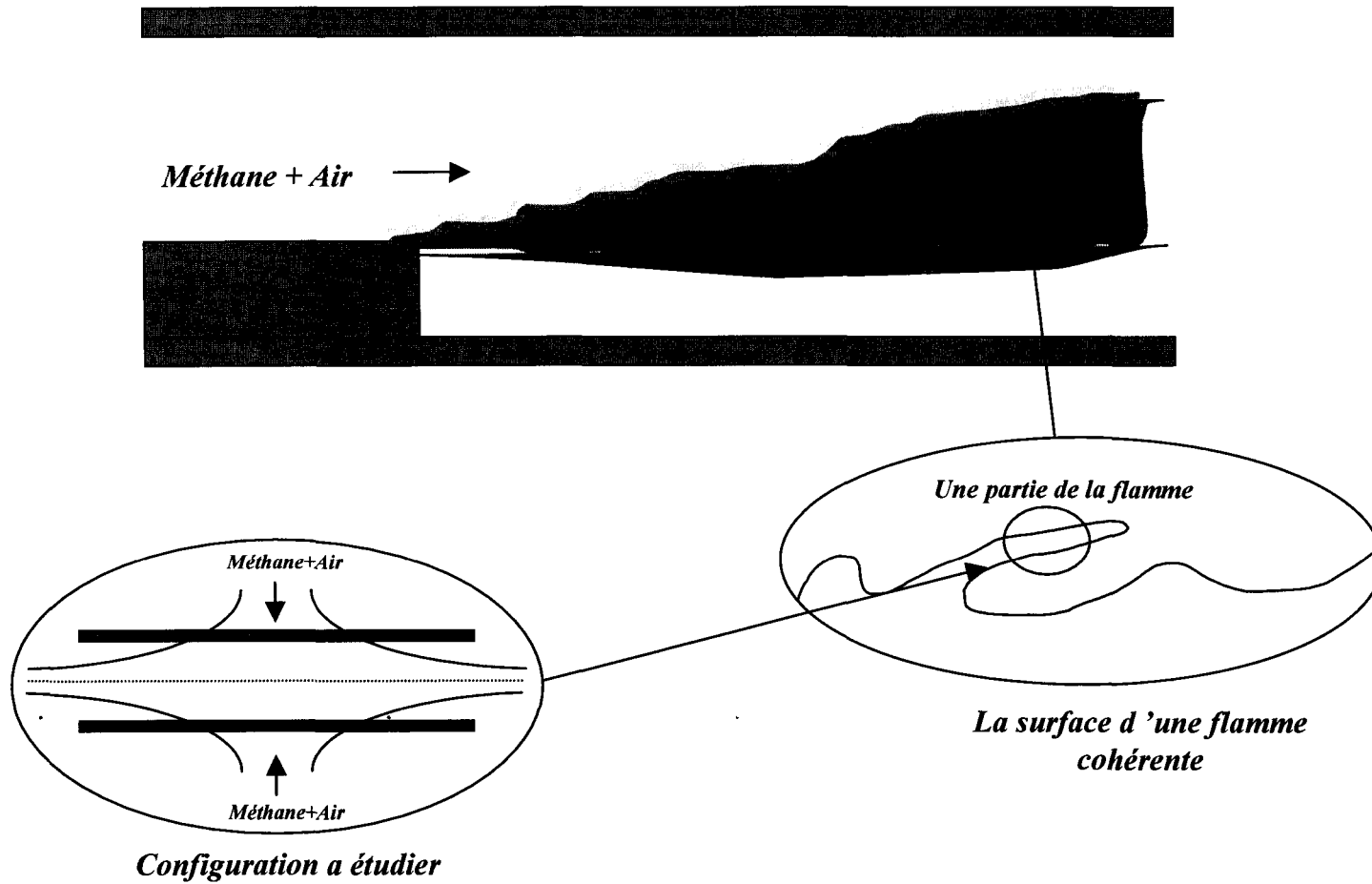
- 50 Tsuji, H. and Yamaoka, I. (1967) – “ The counterflow diffusion flame in the forward stagnation region of a porous cylinder.” *11<sup>th</sup> Symposium (International) on Combustion*, pp. 979
- 51 Tsuji, H (1982) – “ Counterflow diffusion flames.” *Progress in Energy and Combustion Science*, **8**, pp. 93-119
- 52 Williams, F.A. (1965) – “ Combustion theory.” Addison Wesley Publishing Company, Inc London.
- 53 Zeldovitch, J.B. and Frank-Kamenetski, D.A. (1938) – “ A theory of thermal propagation of flame.” *Acta Physicochimica*, pp. 341-350

## ***FIGURES***



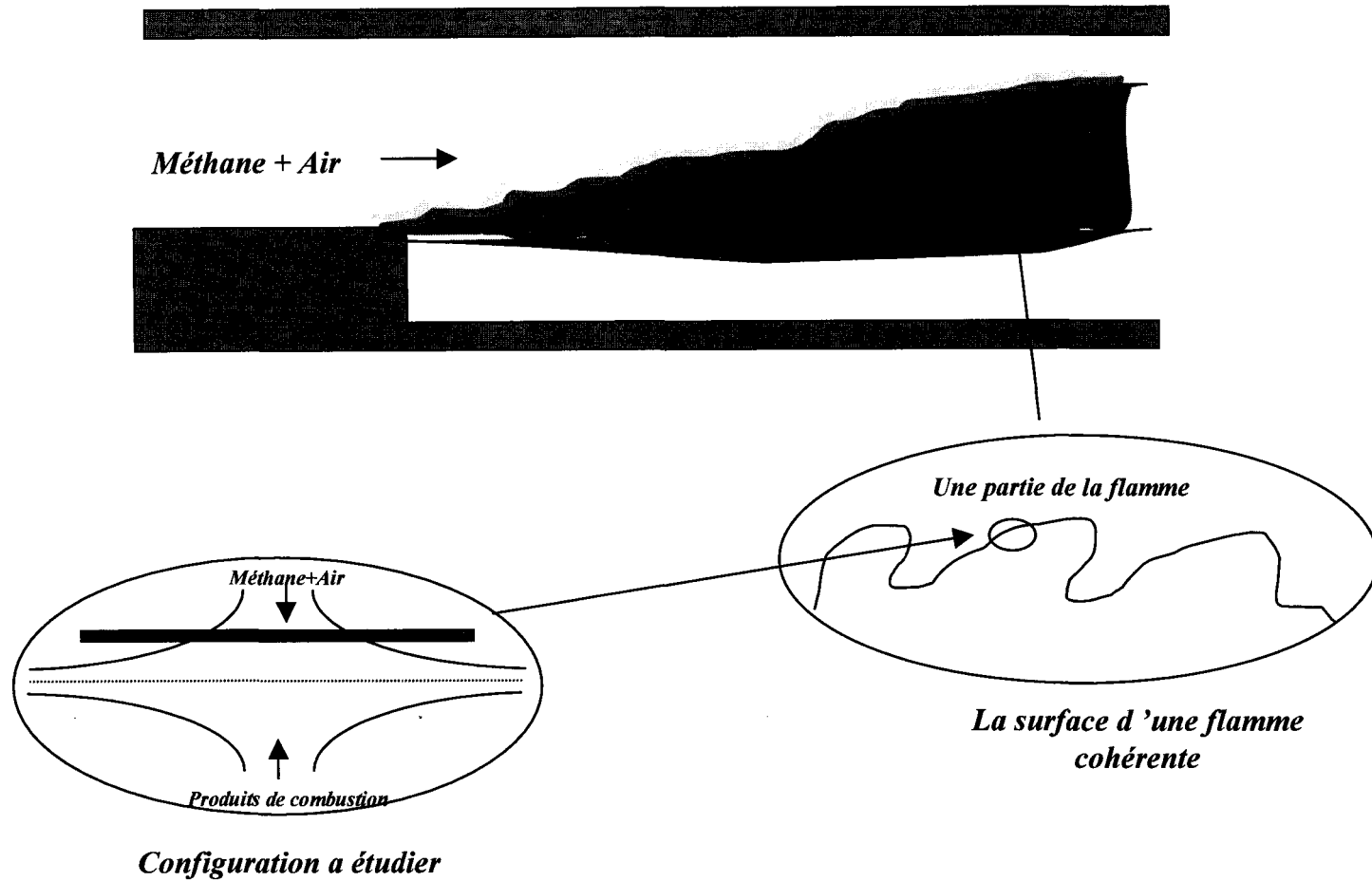
*Figure 1: Modèle de la flamme cohérente*

*Une flamme de prémélange dans un écoulement turbulent*



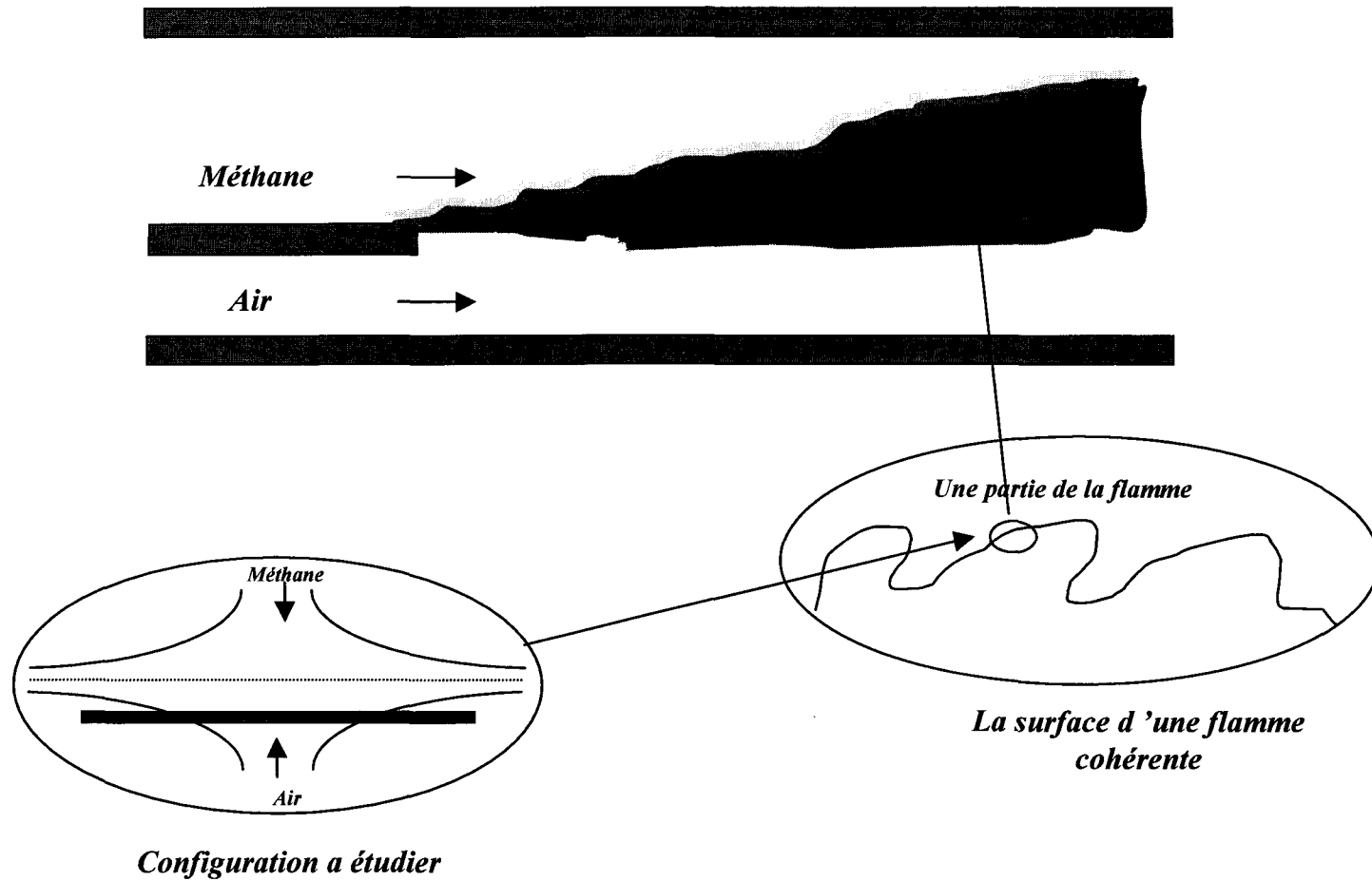
*Figure2: Flamme de prémélange (configuration double flamme)*

*Une flamme de prémélange dans un écoulement turbulent*



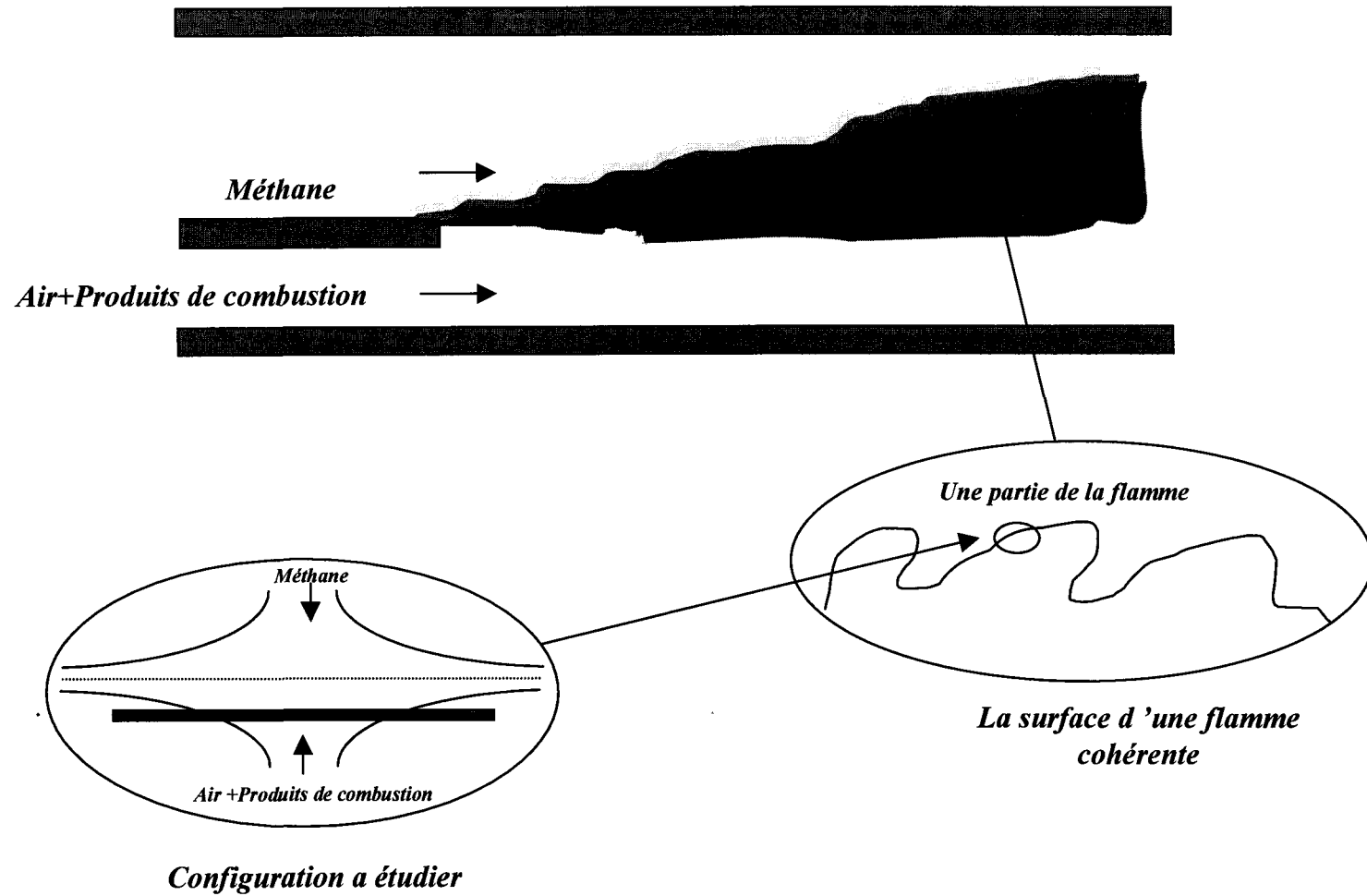
*Figure3: Flamme de prémélange (configuration simple flamme)*

# *Une flamme de diffusion dans un écoulement turbulent*

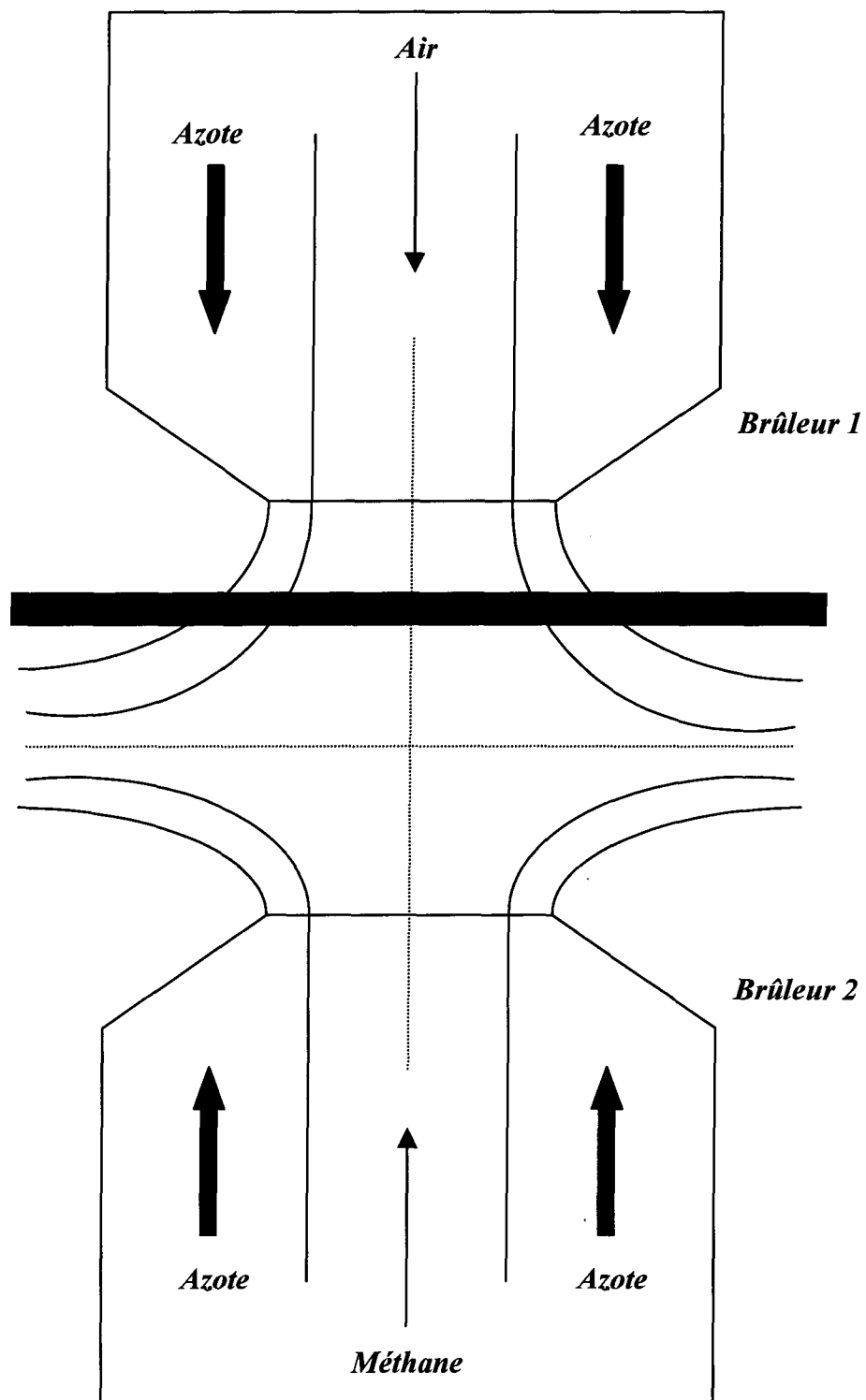


*Figure4: Flamme de diffusion*

*Une flamme de diffusion dans un écoulement turbulent*

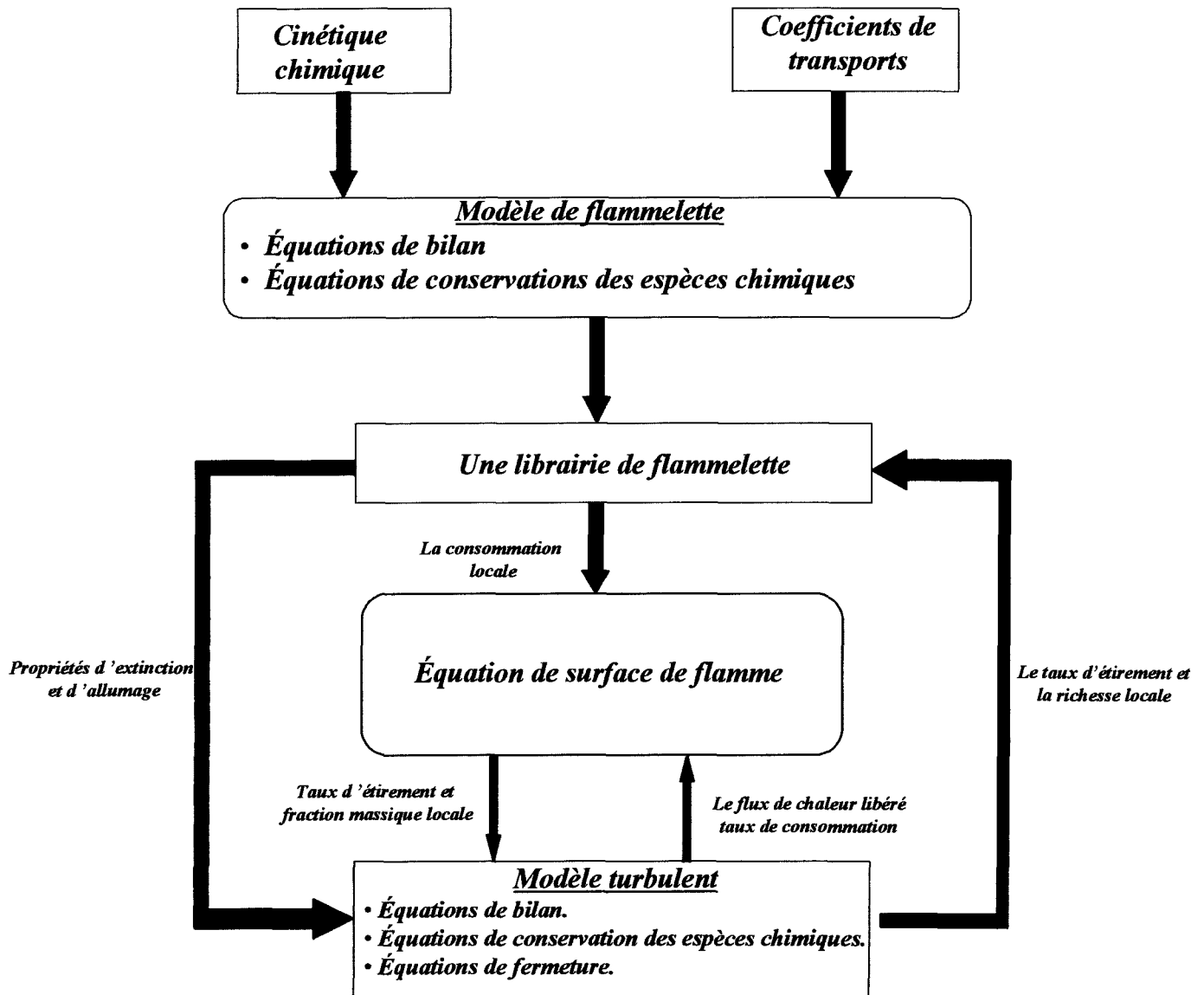


*Figure 5: Flamme de diffusion (viciée par des produits de combustion)*

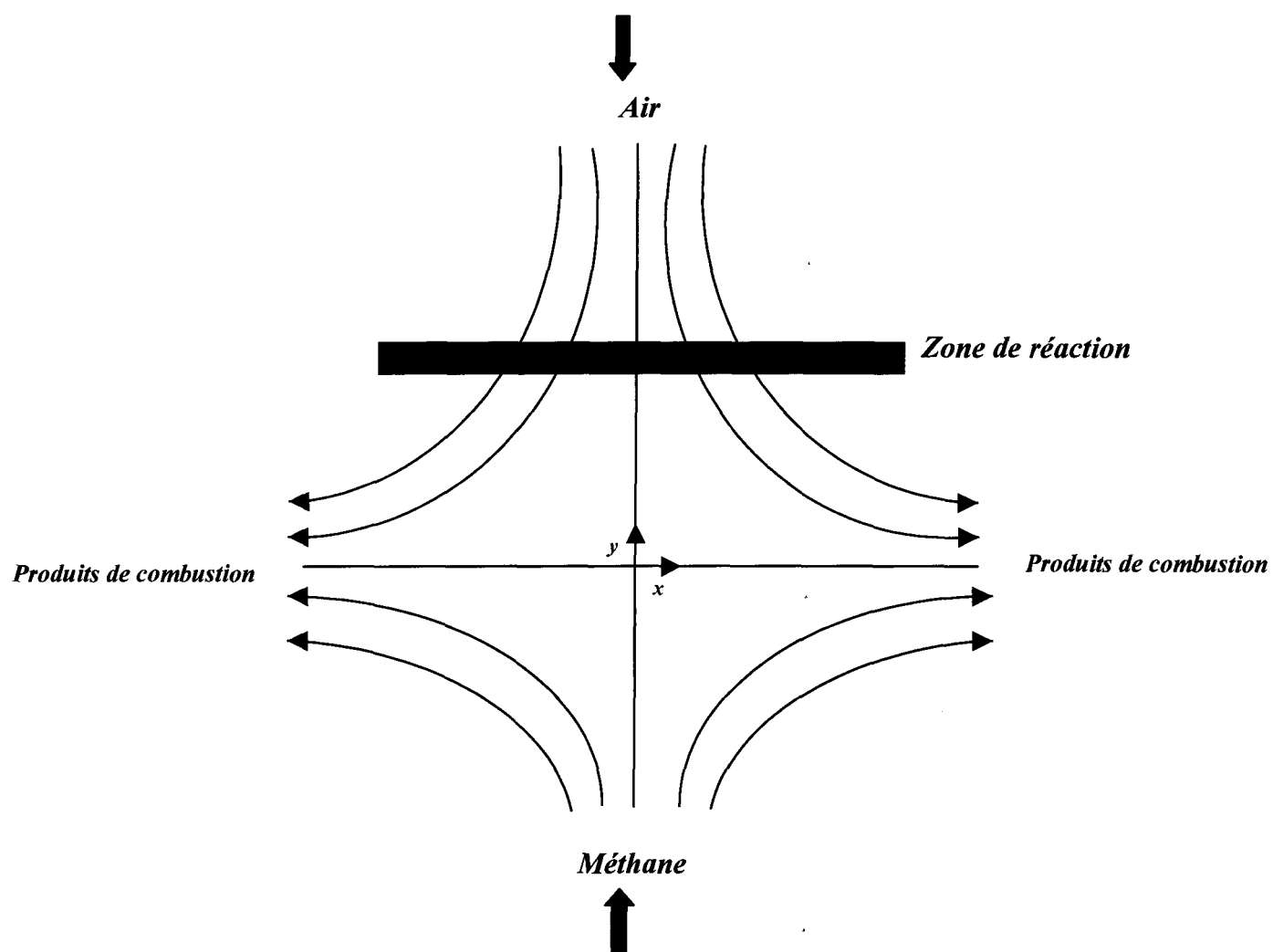


*Figure6: un dispositif expérimental pour réaliser une flammelette*

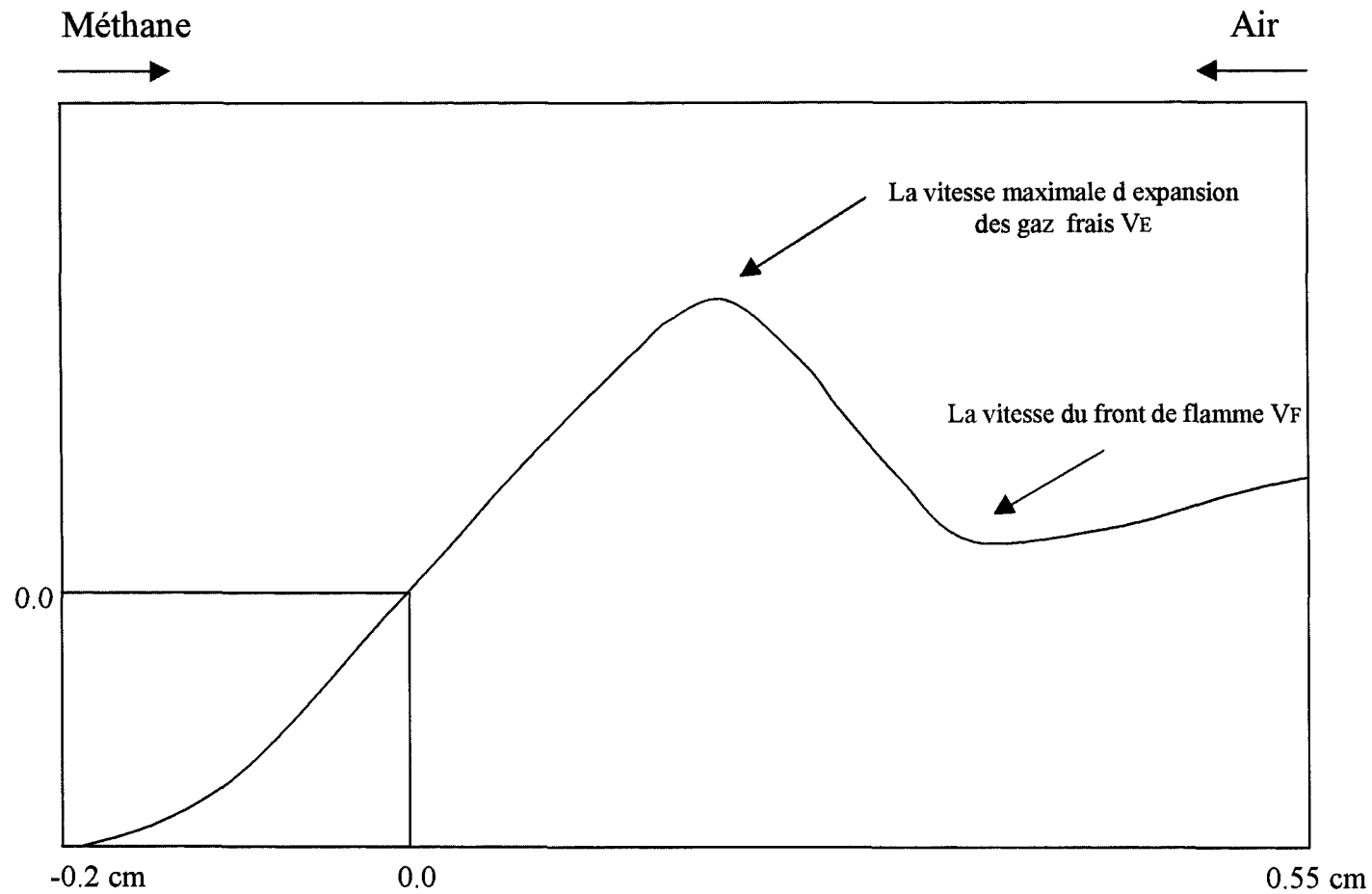




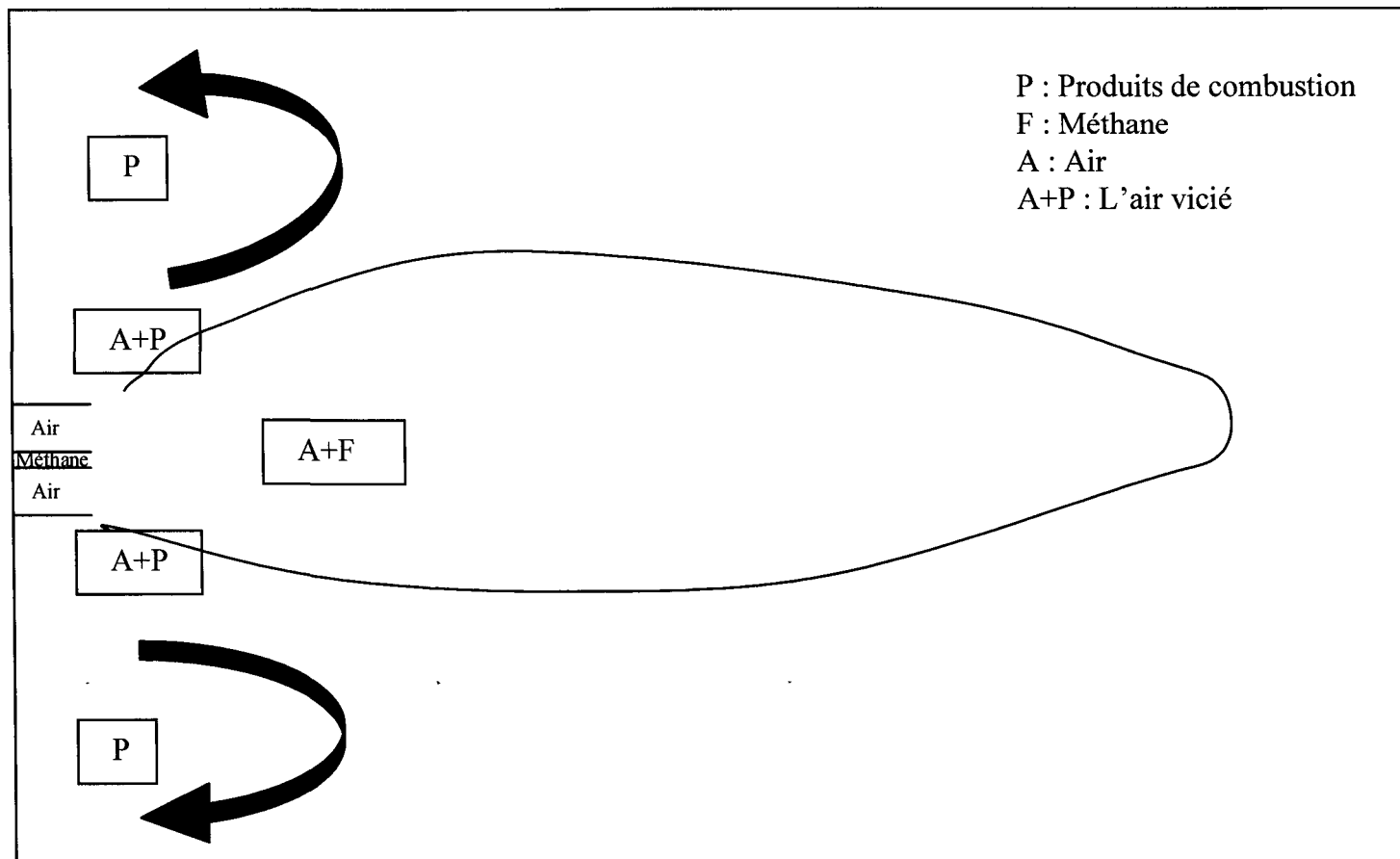
*Figure 7: interaction du modèle de la flammelette et du modèle de combustion global .*



*Figure8: Configuration étudiée*



**Figure 9:** La position de la vitesse d'expansion des gaz frais  $V_E$  et du front de flamme  $V_F$ .



***Figure 10: Zones de recirculation et de viciation par des produits de combustion***

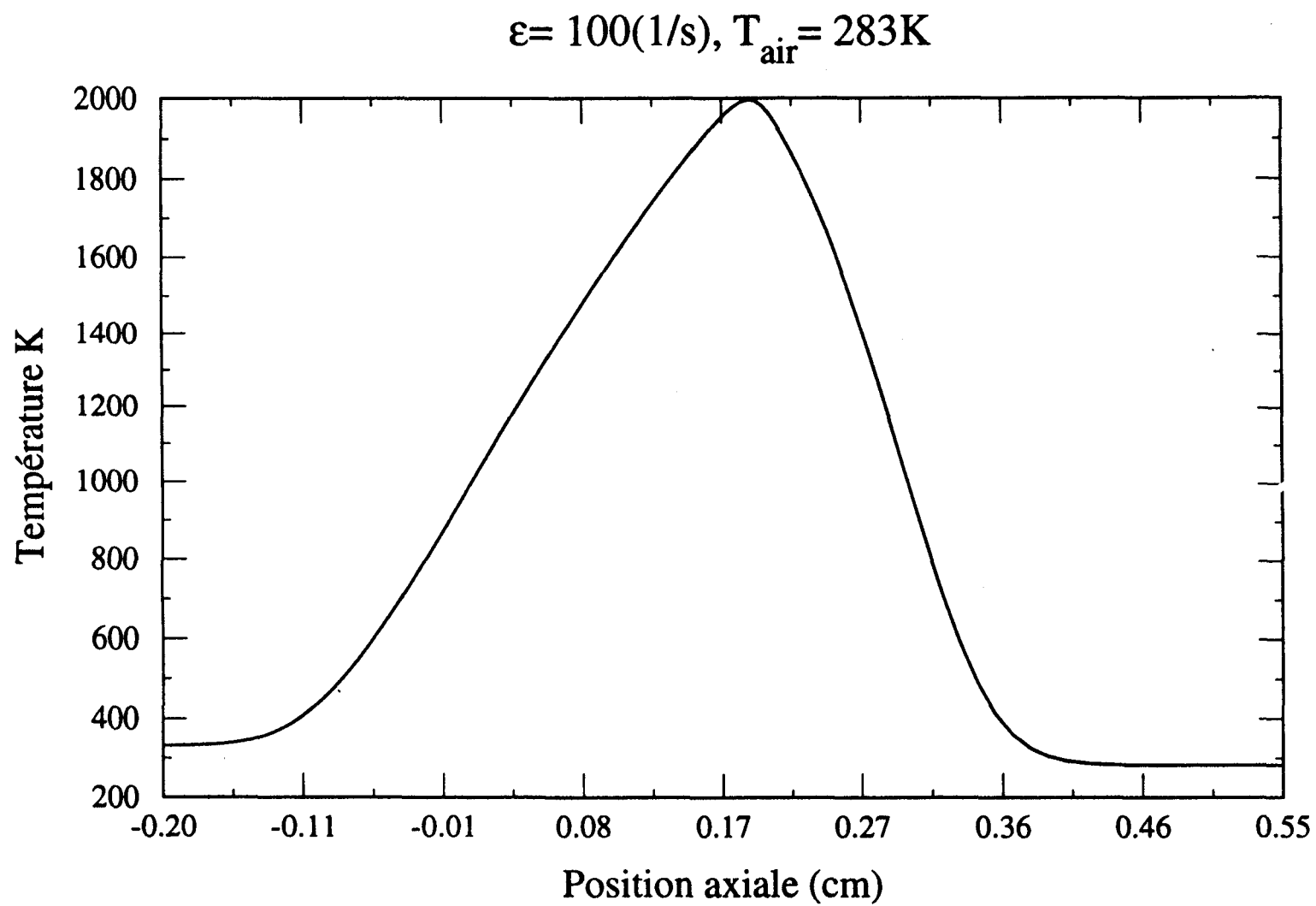


Figure (3.1a): Le profil de température ( $T_{\text{air}} = 283.K$ ,  $T_{\text{fuel}} = 332.K$  et  $\epsilon = 100 s^{-1}$ ).

$\varepsilon = 100 \text{ (1/s)}, T_{\text{air}} = 283\text{K}$

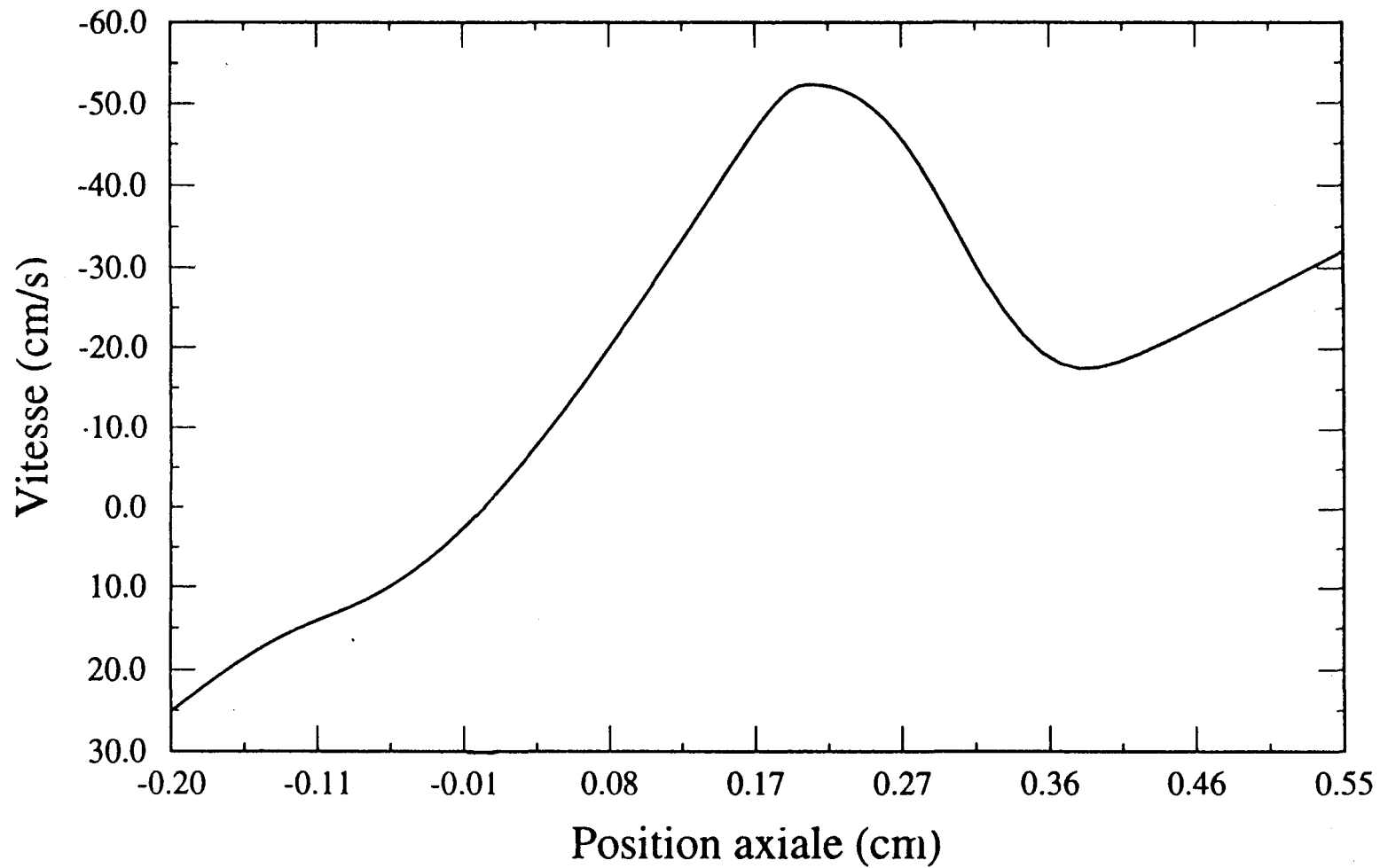


Figure (3.1b) : Le profil de vitesse axiale ( $T_{\text{air}} = 283\text{K}$ ,  $T_{\text{fuel}} = 332\text{K}$  et  $\varepsilon = 100 \text{ s}^{-1}$ ).

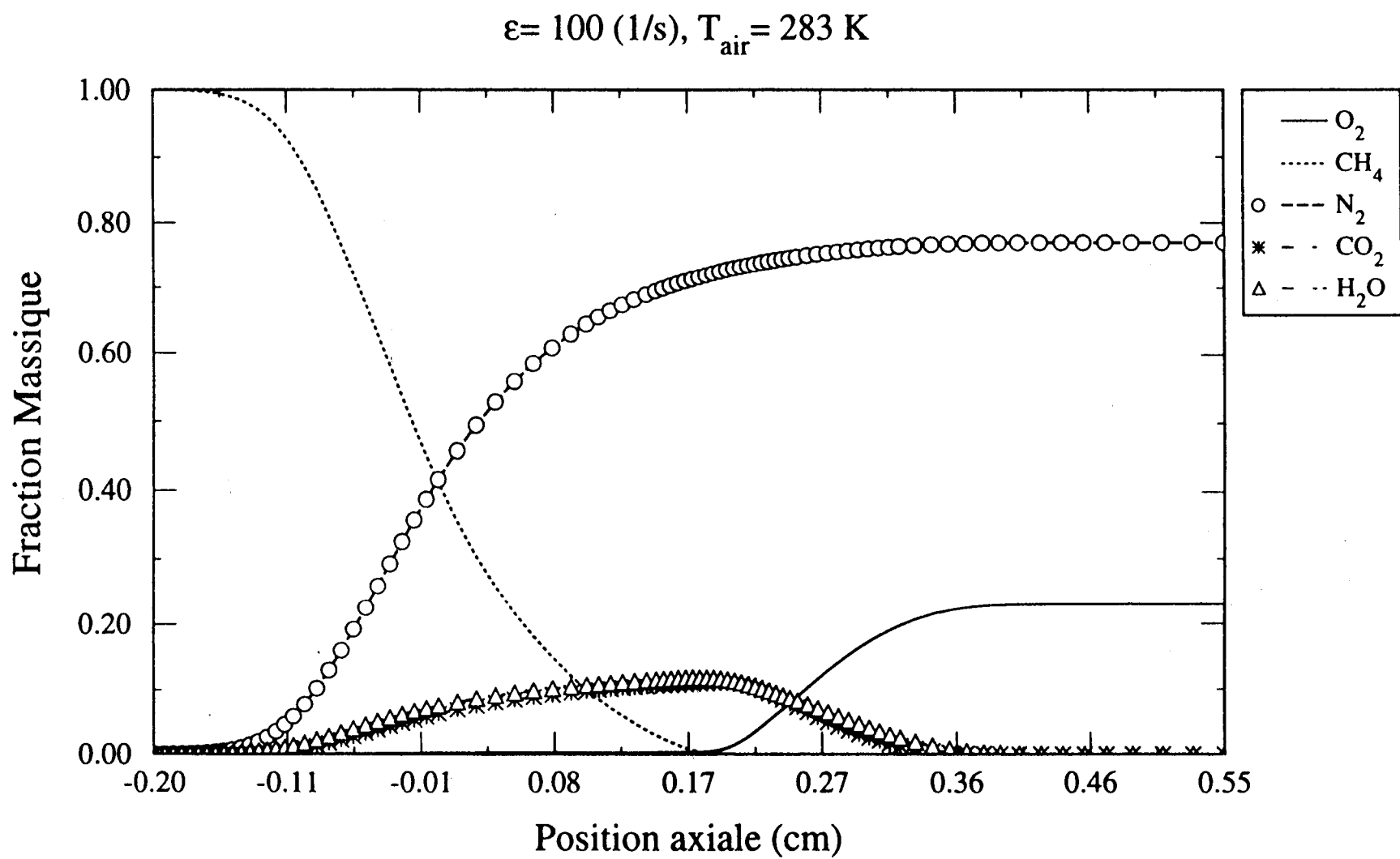


Figure (3.1c) : Le profil des fractions massiques des espèces majoritaires

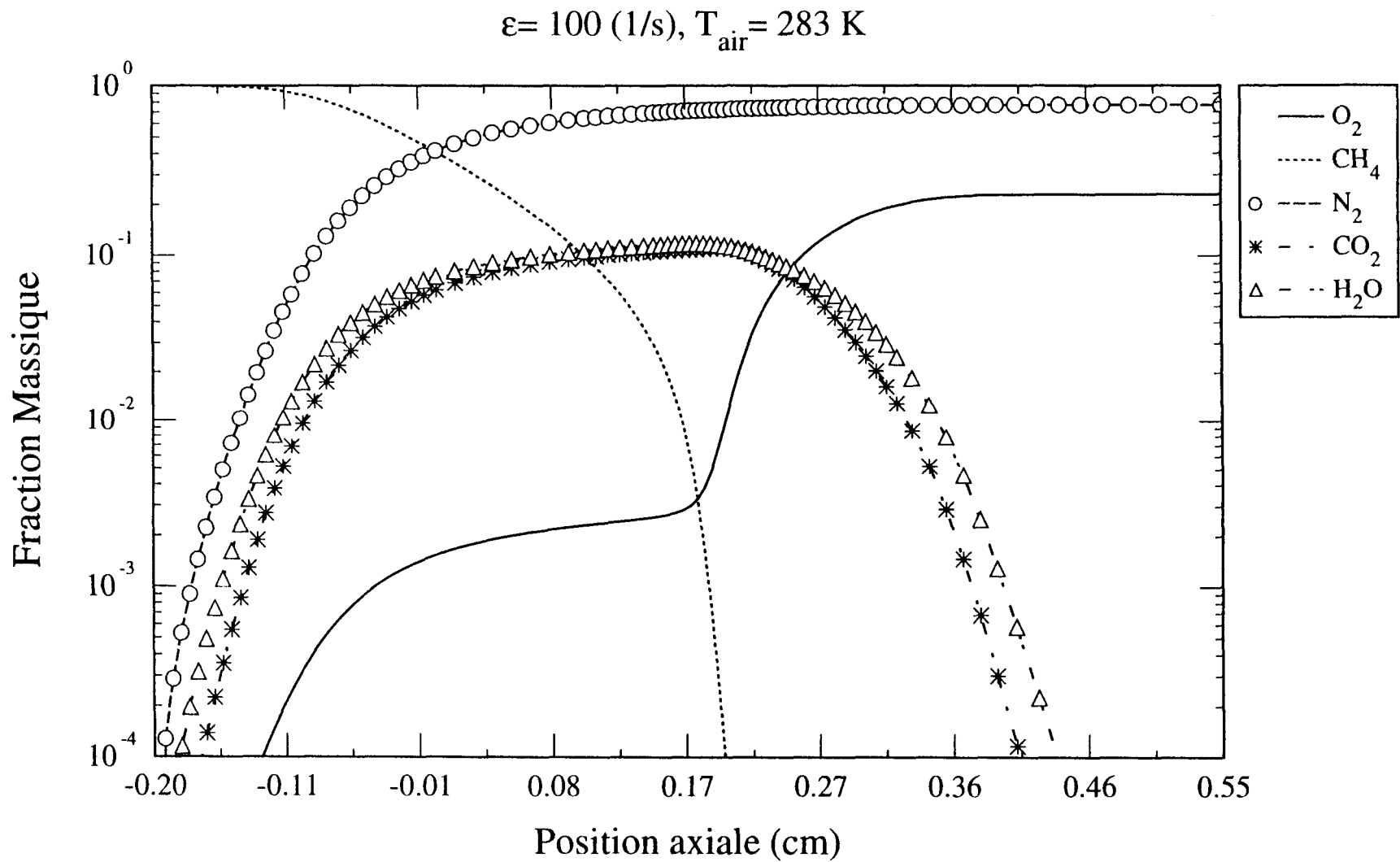


Figure (3.1d) : Le profil des fractions massiques des espèces majoritaires en échelle logarithmique



$\varepsilon = 100 \text{ (1/s)}, T_{\text{air}} = 283 \text{ K}$

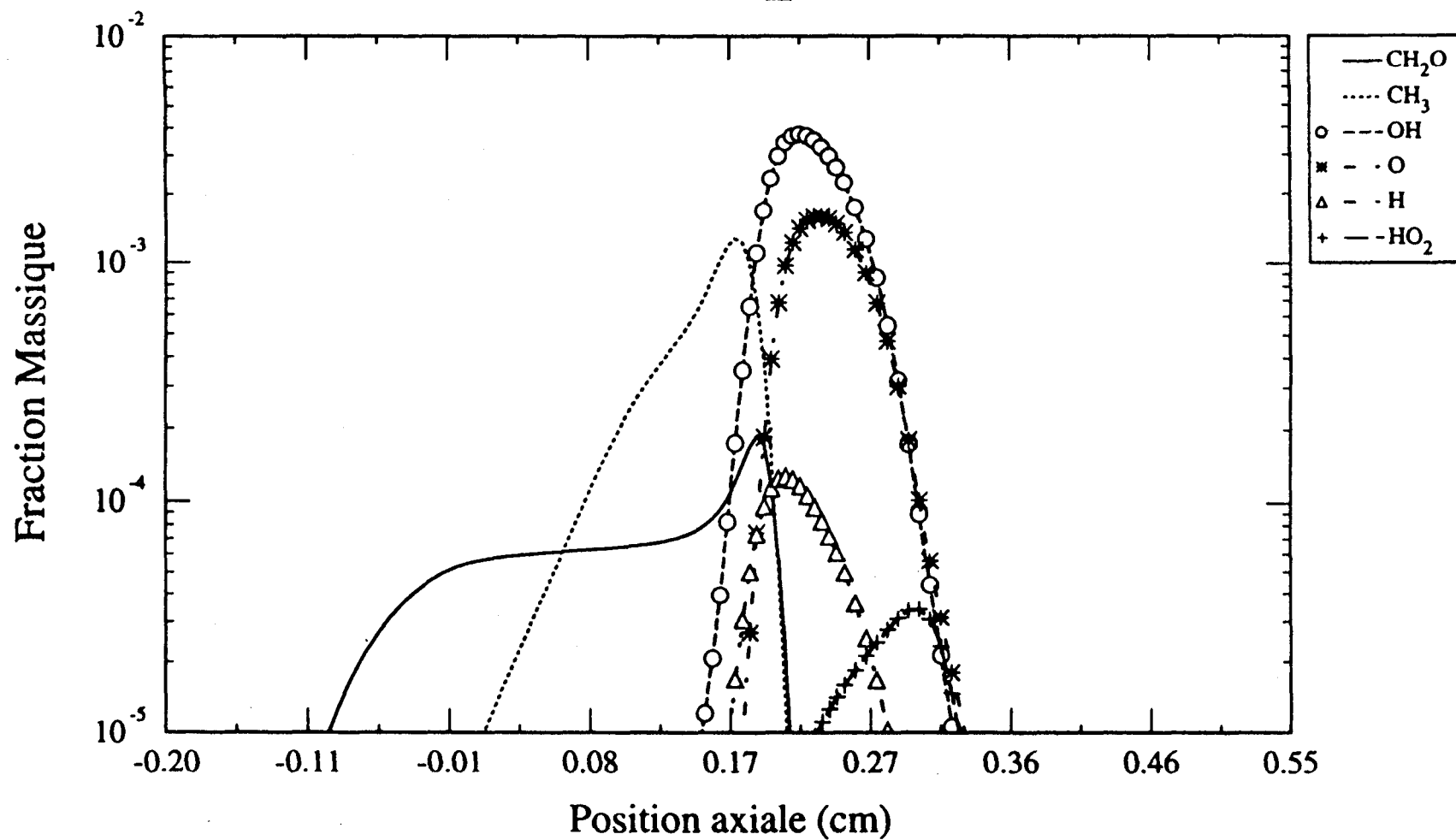


Figure (3.1e) : Le profil des fractions massiques des espèces mineures

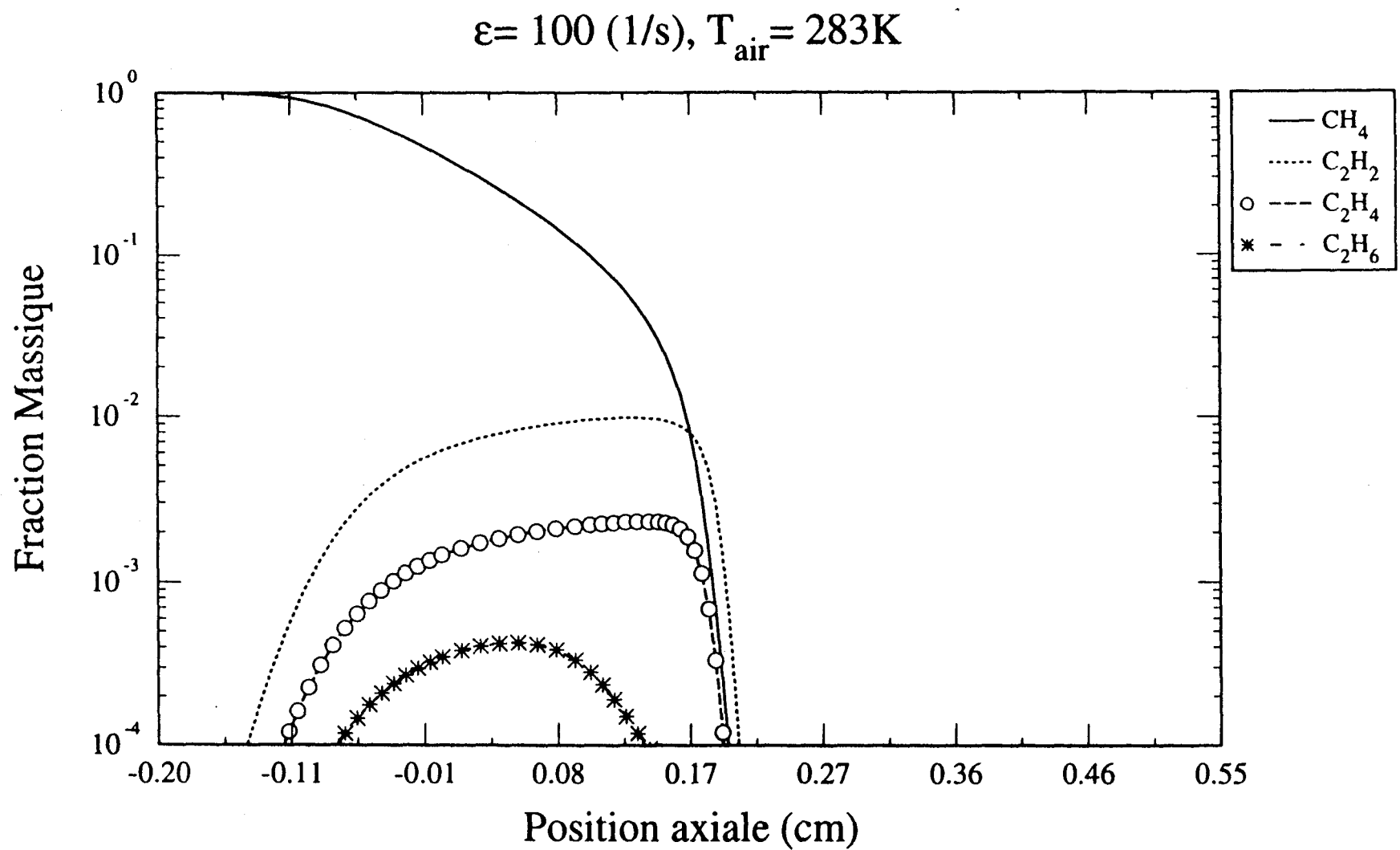


Figure (3.1f) : Le profil des fractions massiques des espèces  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{CH}_4$ .

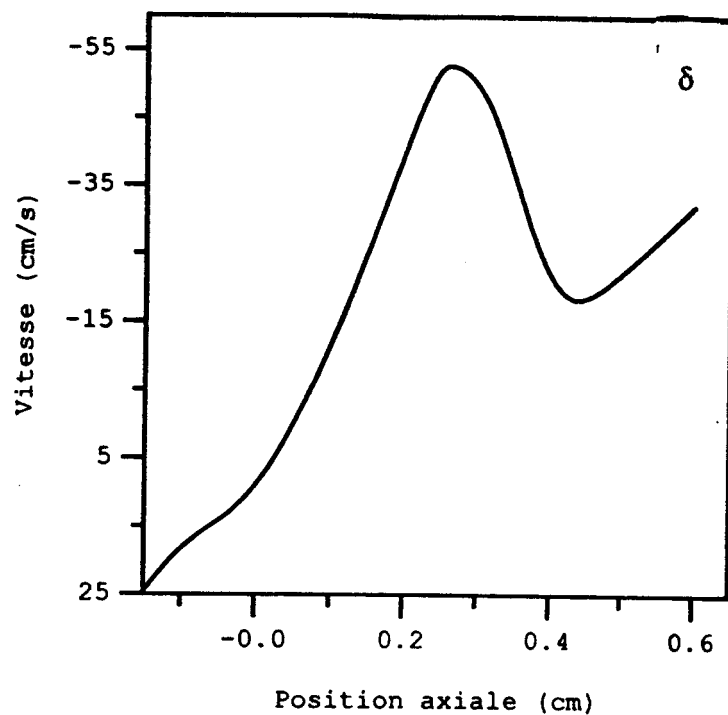
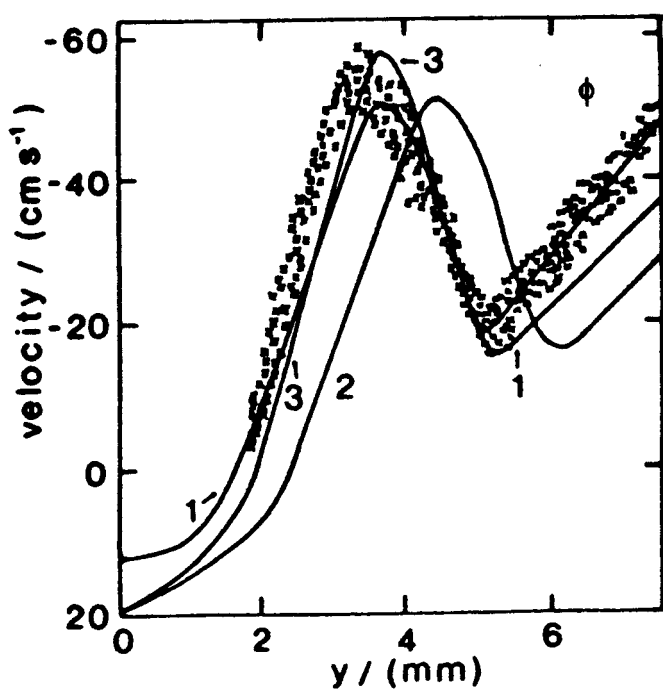
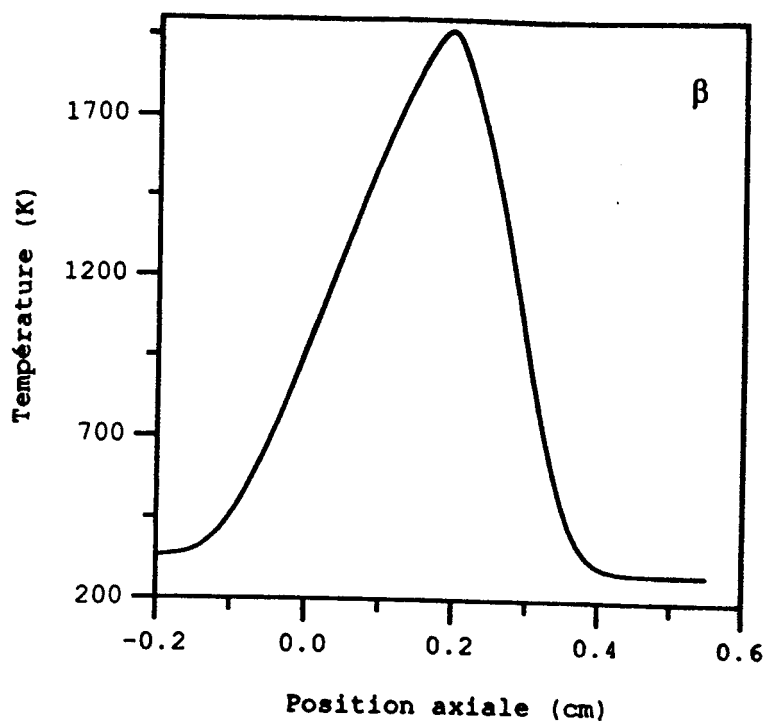
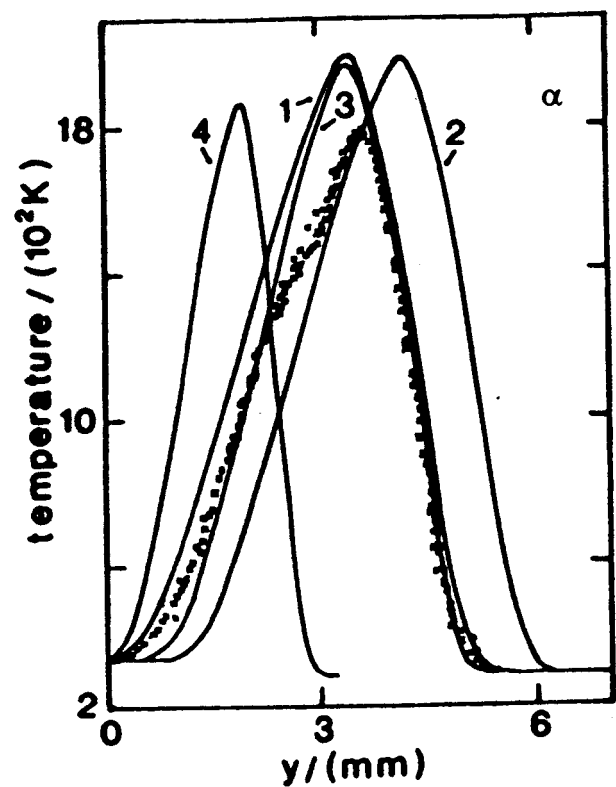


Figure (3.1g) :

α : Profil de température de Dixon-Lewis

β : Profil de vitesse de Dixon-Lewis

δ : Profil de température de la présente étude

φ : Profil de la vitesse axiale de la présente étude

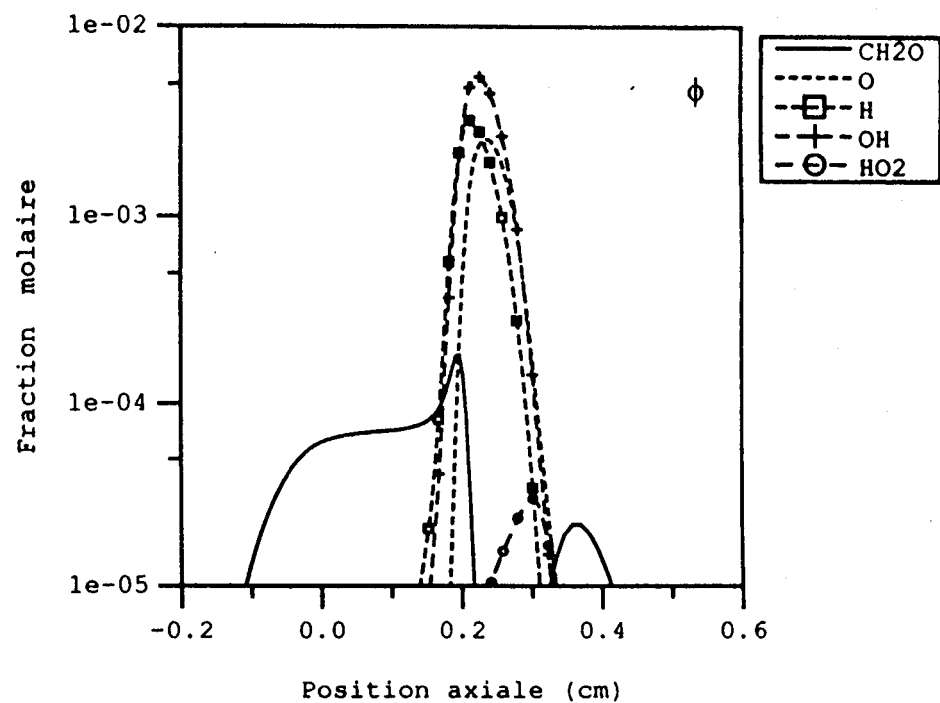
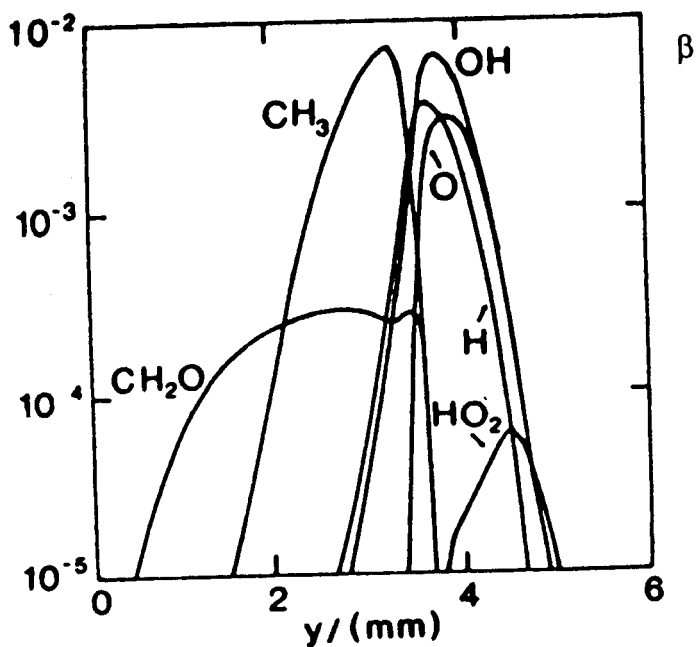
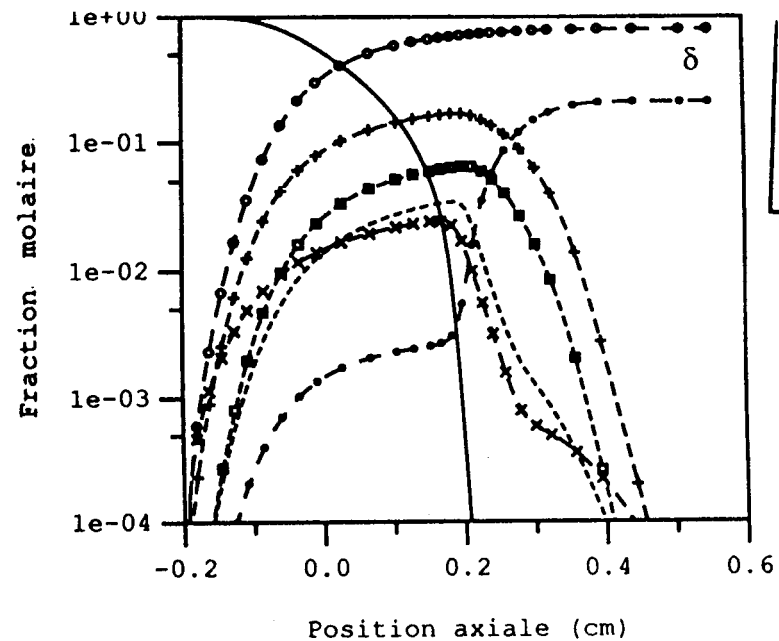
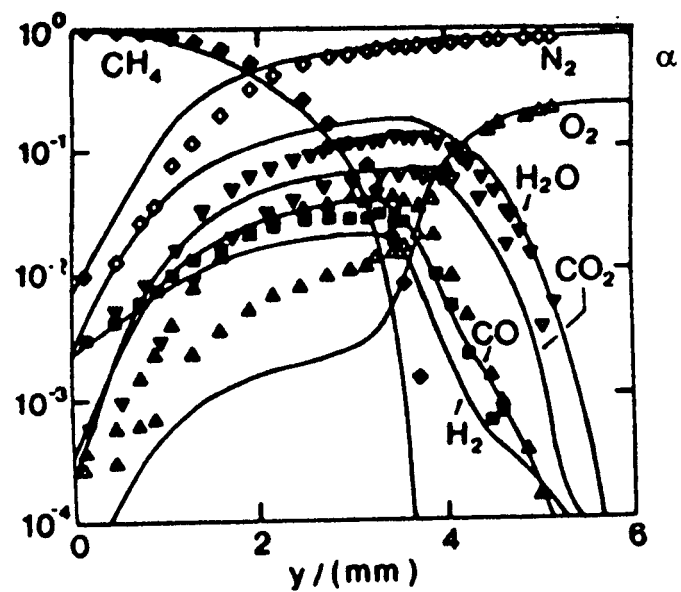


Figure (3.1h) :

α : La fraction molaire des espèces majoritaire (Dixon-Lewis)  
 β : La fraction molaire des espèces minoritaire (Dixon-Lewis)  
 δ : La fraction molaire des espèces majoritaire de la présente étude  
 φ : La fraction molaire des espèces minoritaire de la présente étude.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{fuel}} = 332\text{K}$$

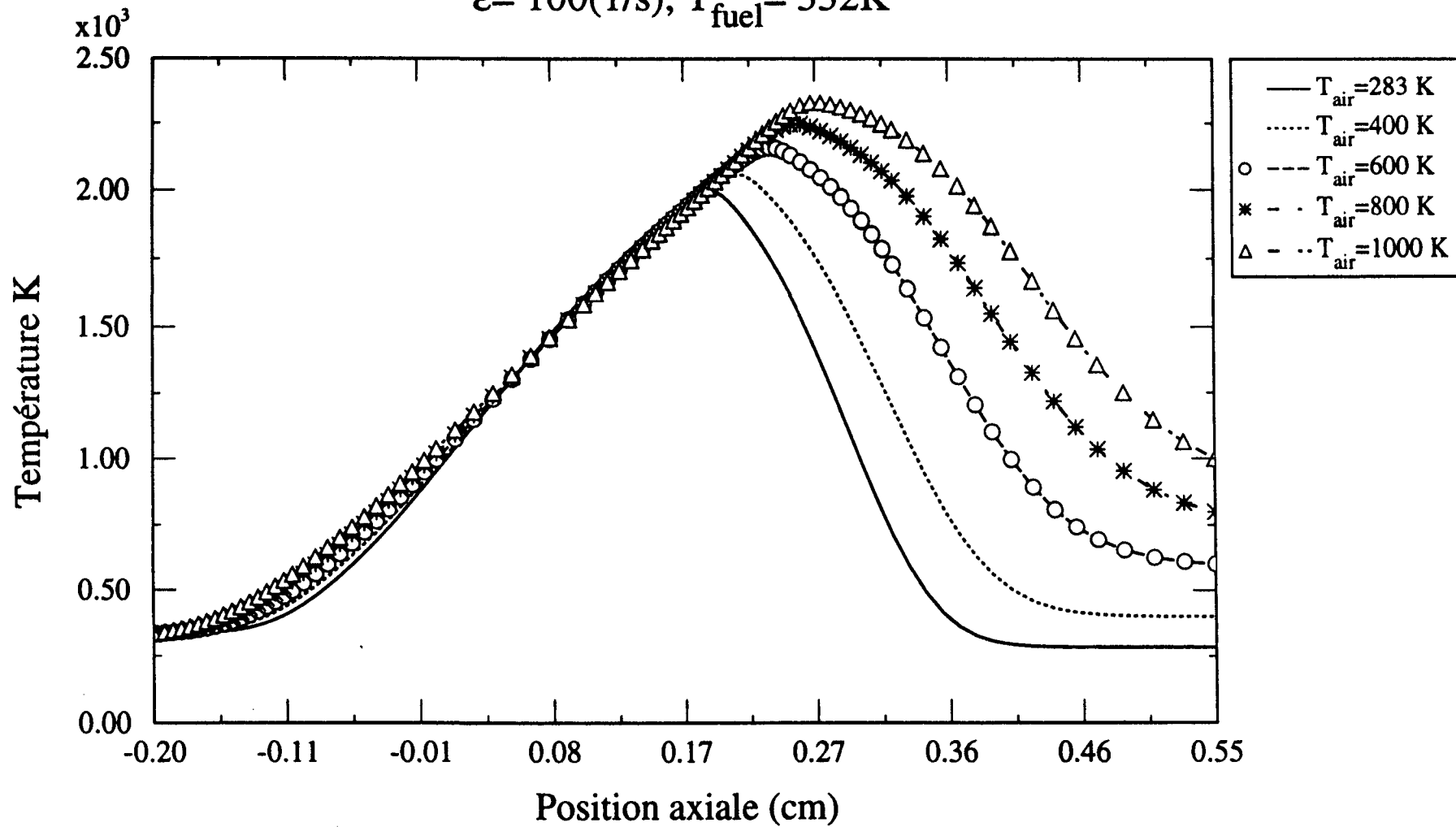


Figure (3.1.2a): Le profil de température de fin de combustion pour différentes températures d'injection d'air.

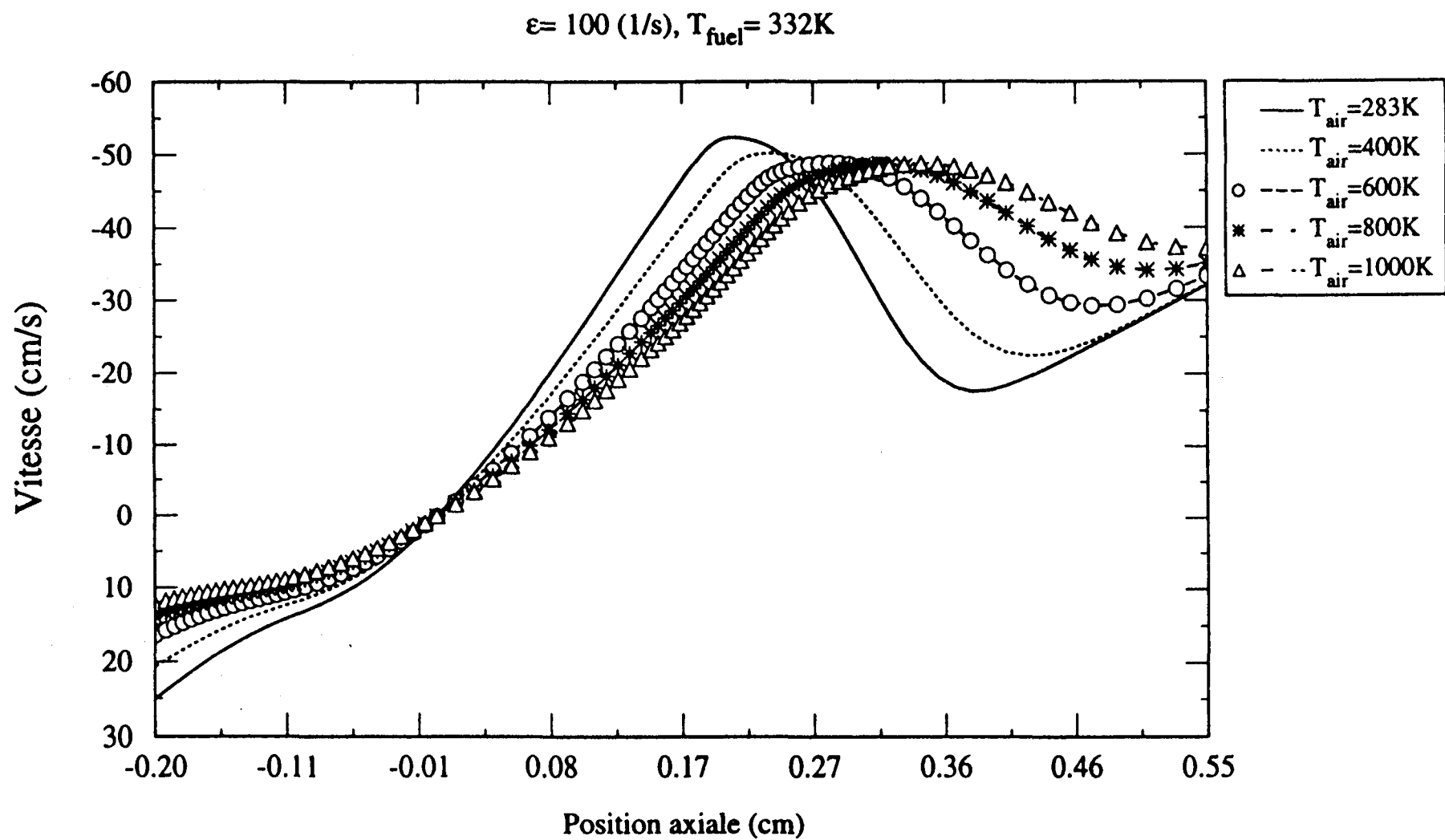


Figure (3.1.2b) : Le profil de vitesse axiale pour différentes températures d'injection d'air.

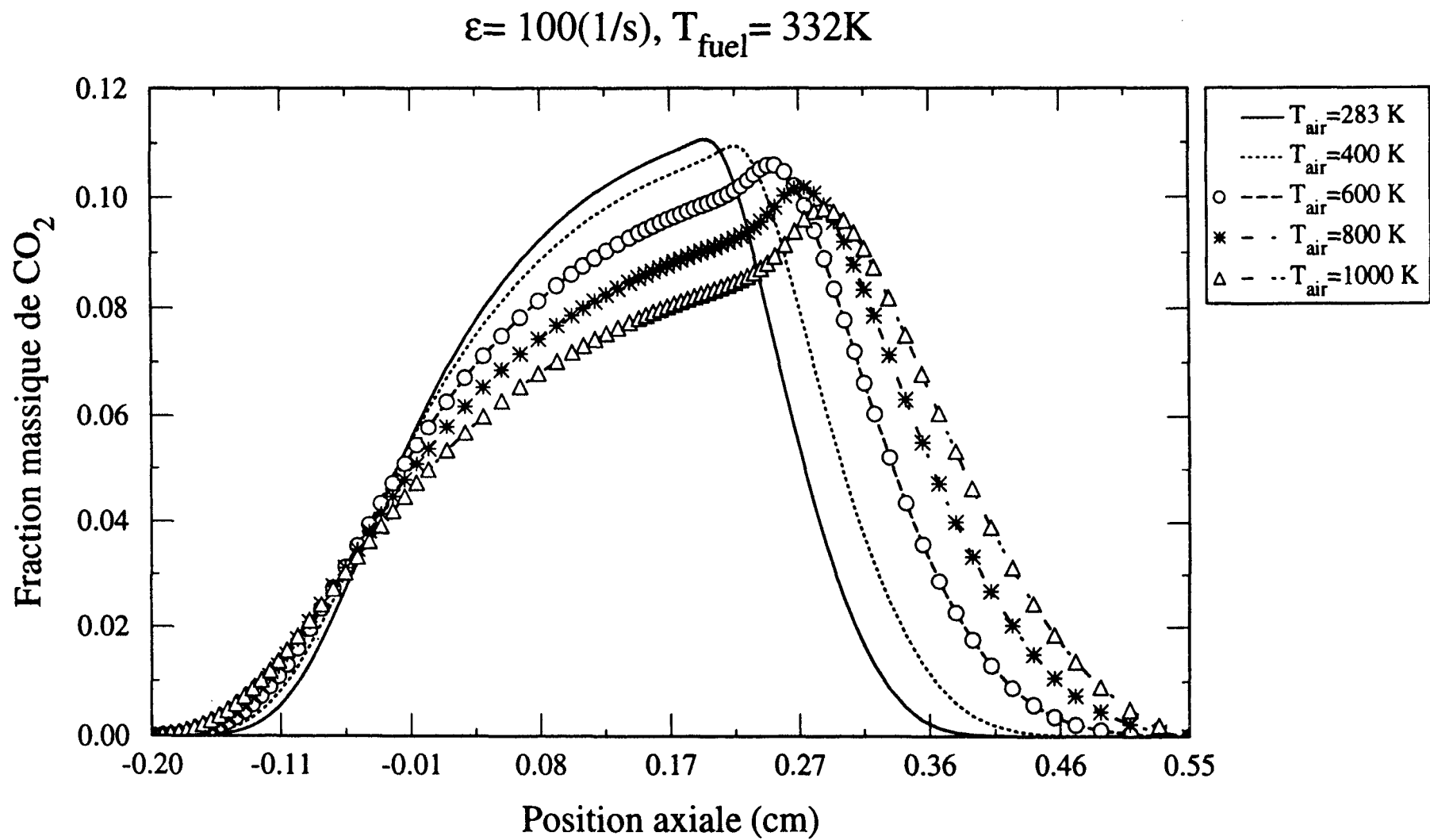


Figure (3.1.2c) : La fraction massique de  $CO_2$  pour différentes températures d'injection d'air.

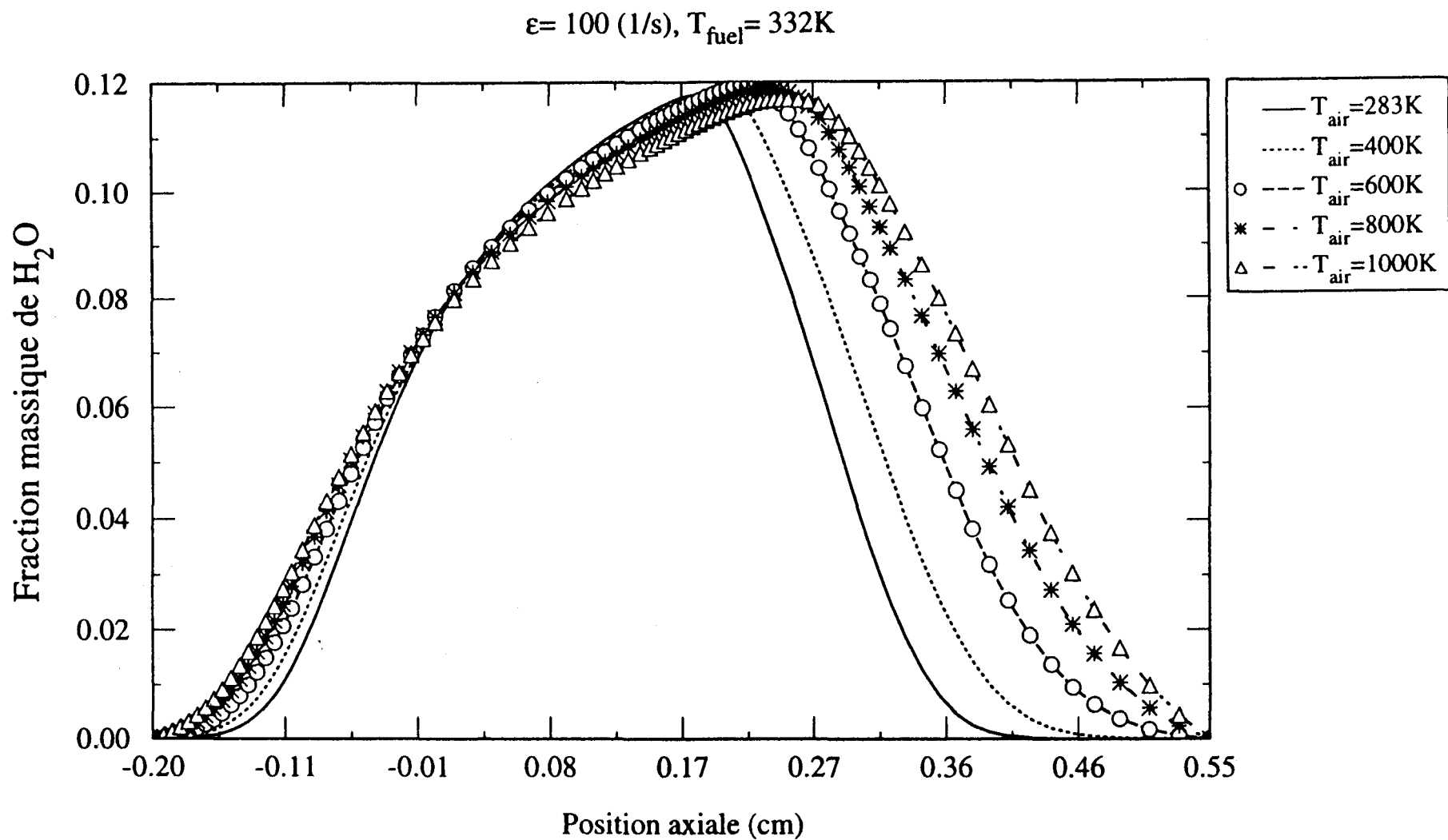


Figure (3.1.2d): La fraction massique de  $\text{H}_2\text{O}$  pour différentes températures d'injection d'air.



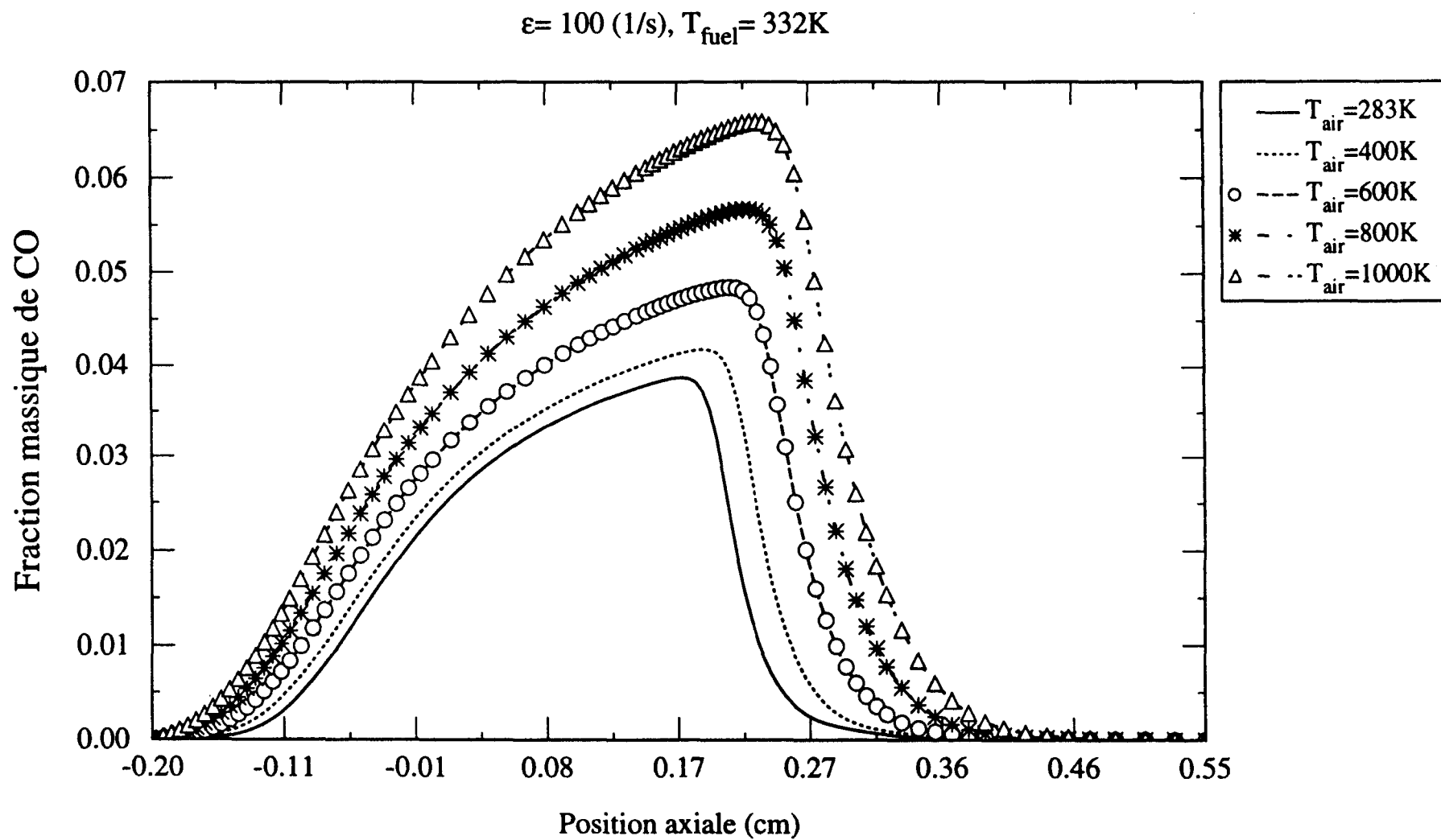


Figure (3.1.2e) : La fraction massique de *CO* pour différentes températures d'injection d'air.

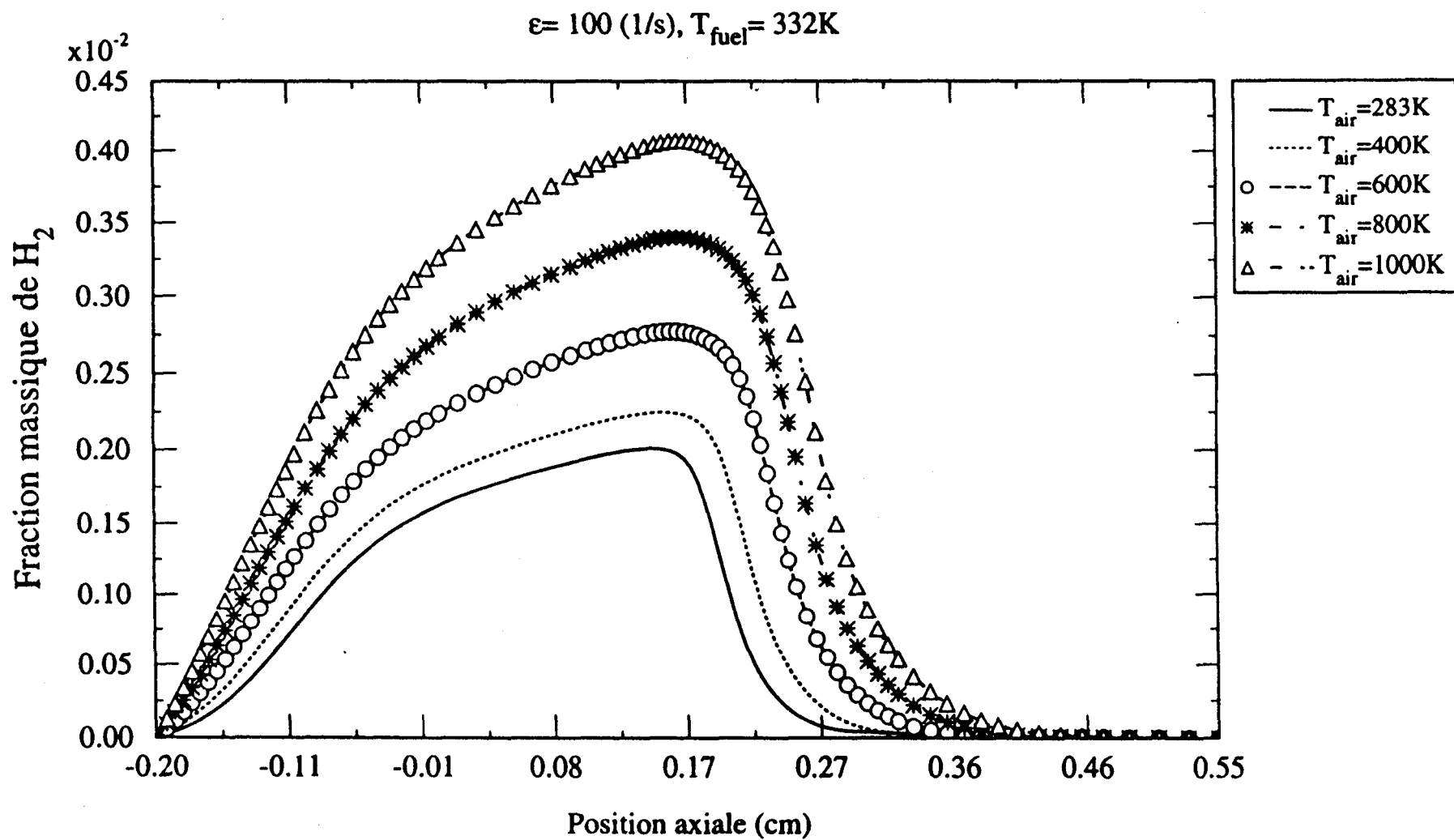


Figure (3.1.2f) : La fraction massique de  $H_2$  pour différentes températures d'injection d'air.

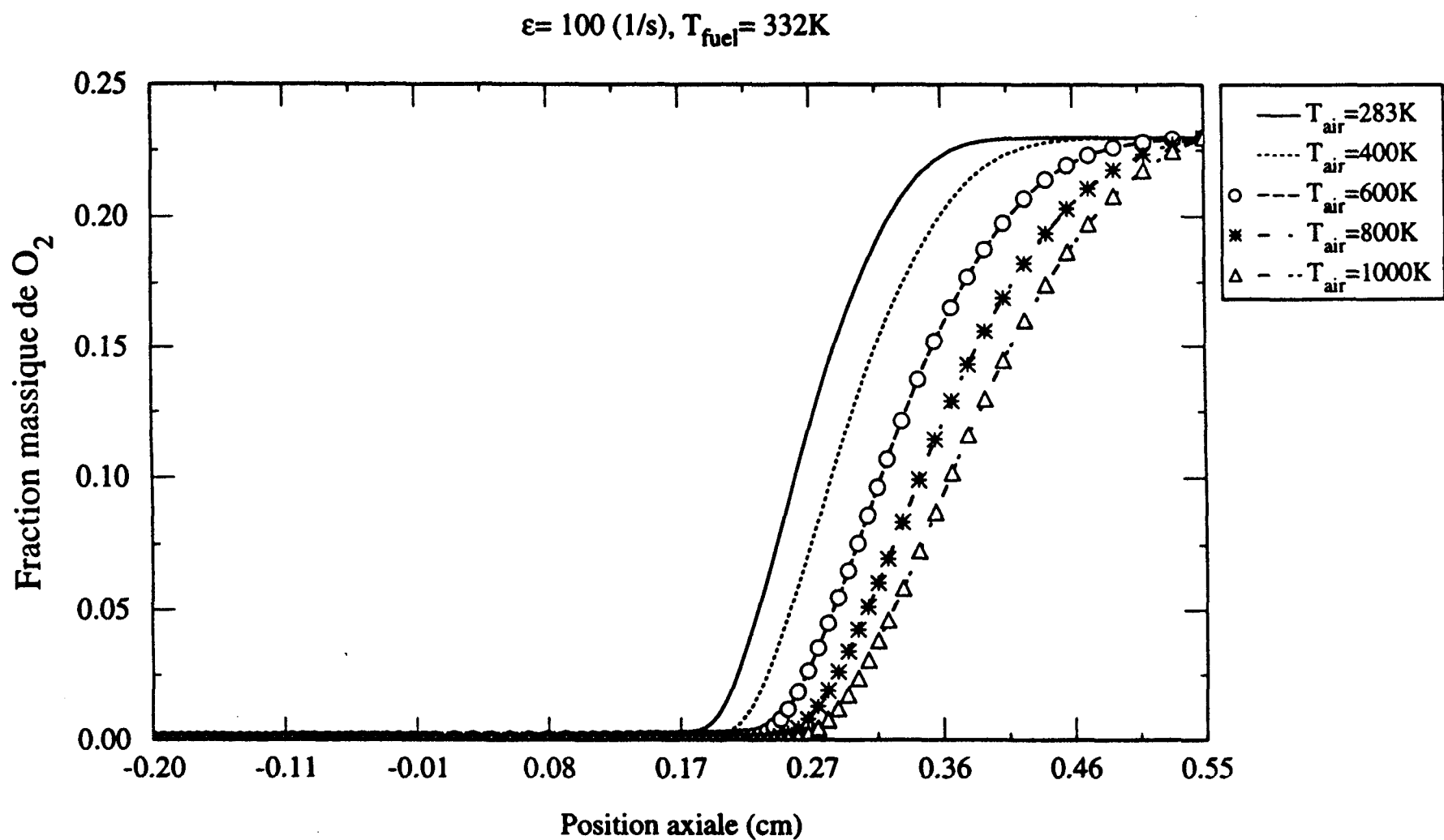


Figure (3.1.2g) : La fraction massique de  $O_2$  pour différentes températures d'injection d'air.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{air}} = 283\text{K}$$

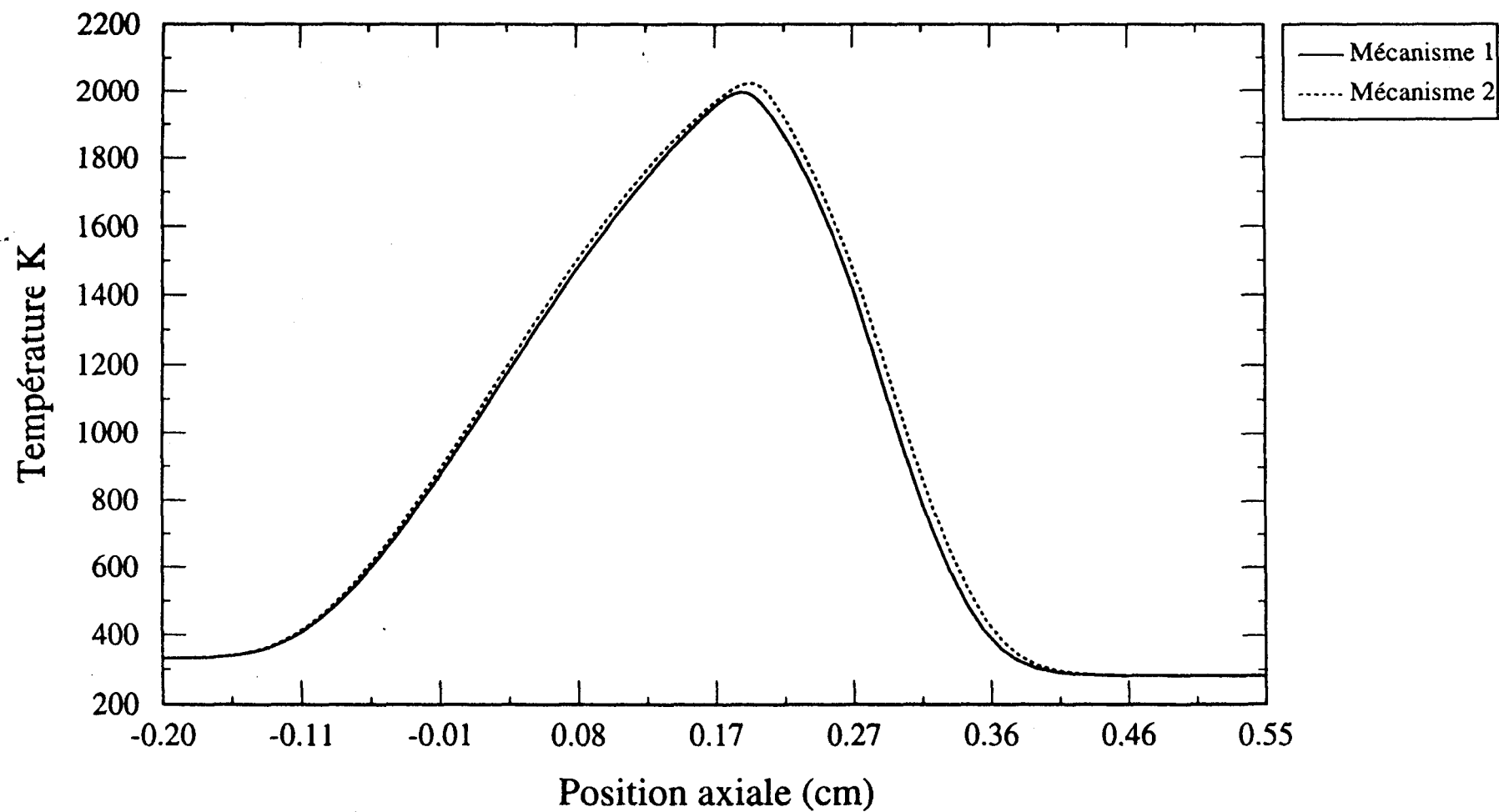


Figure (3.2a): Comparaison des profils de température pour les deux schémas cinétiques.

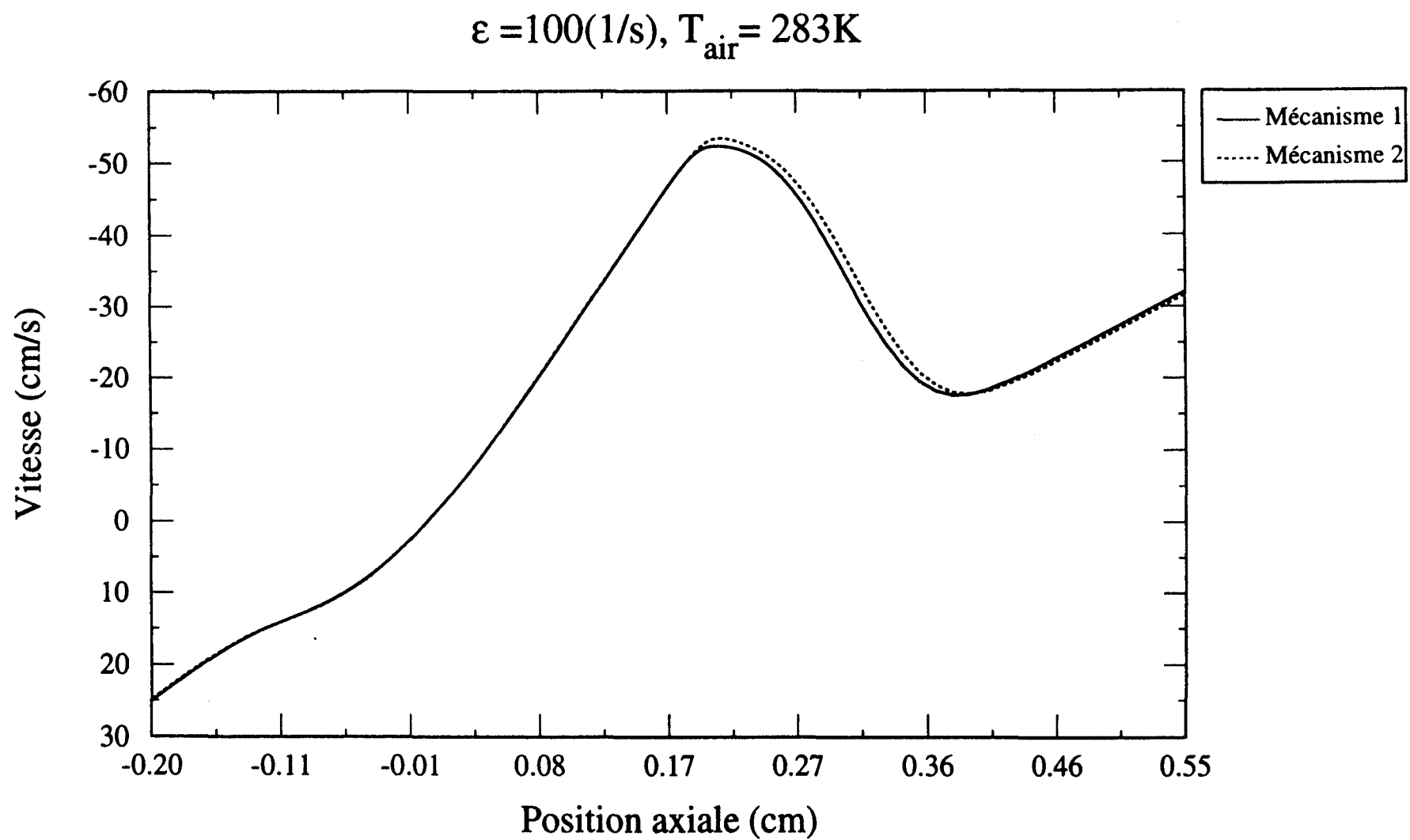


Figure (3.2b): Comparaison des profils de vitesse pour les deux schémas cinétiques.

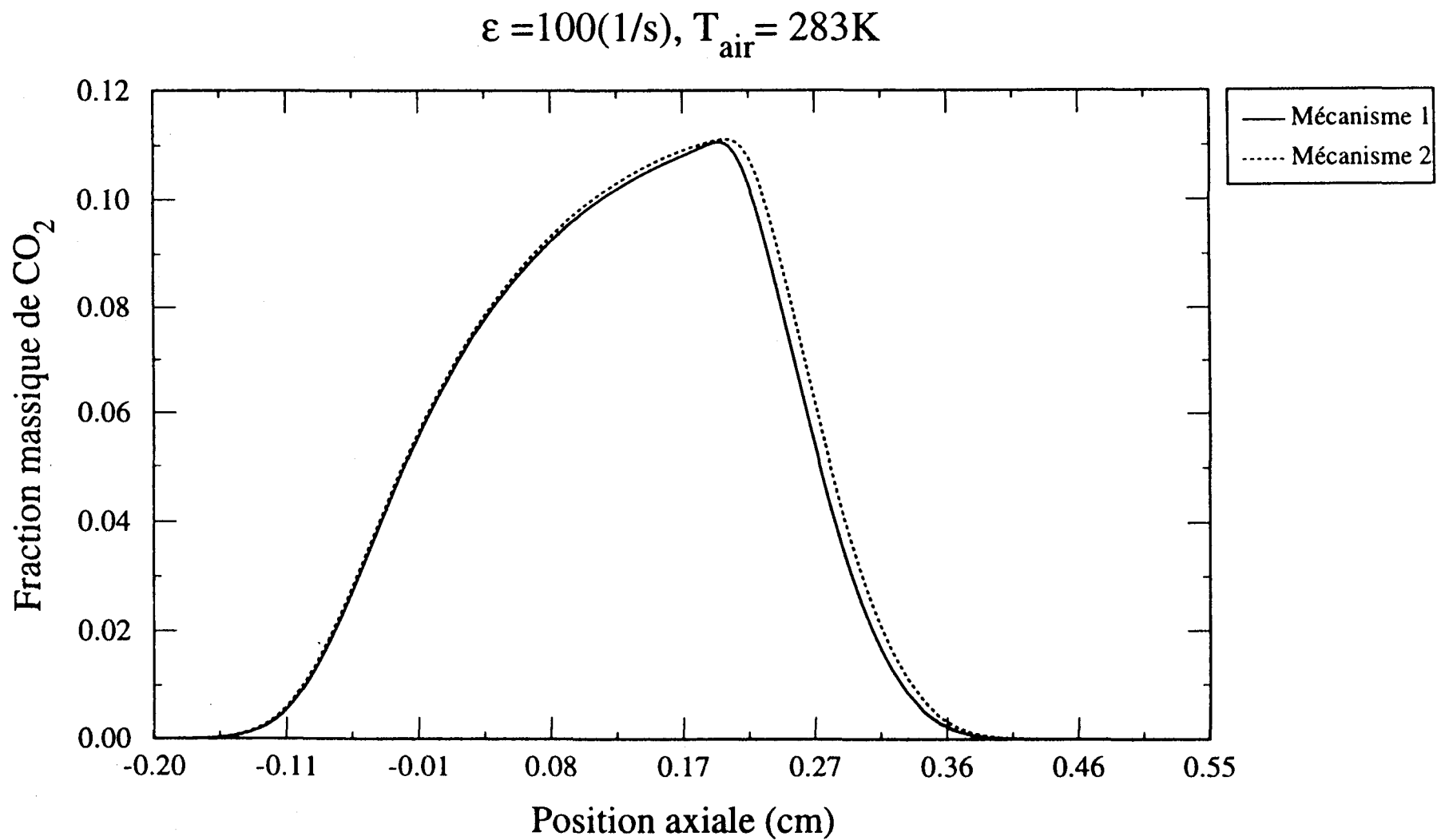


Figure (3.2c) : Comparaison des fractions massiques de  $CO_2$  pour les deux schémas cinétiques.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{air}} = 283K$$

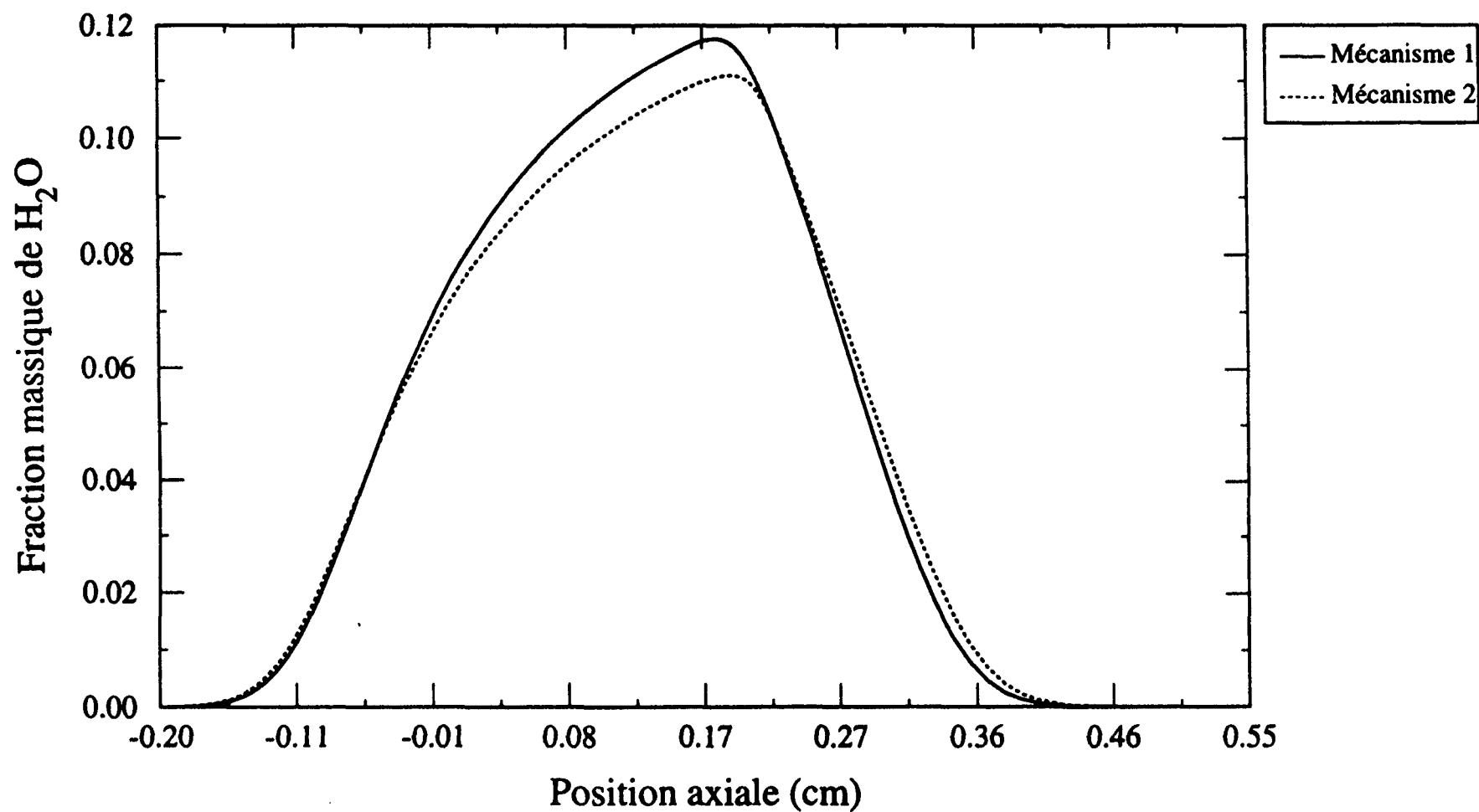


Figure (3.2d) : Comparaison des fractions massiques de  $H_2O$  pour les deux schémas cinétiques.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{air}} = 283K$$

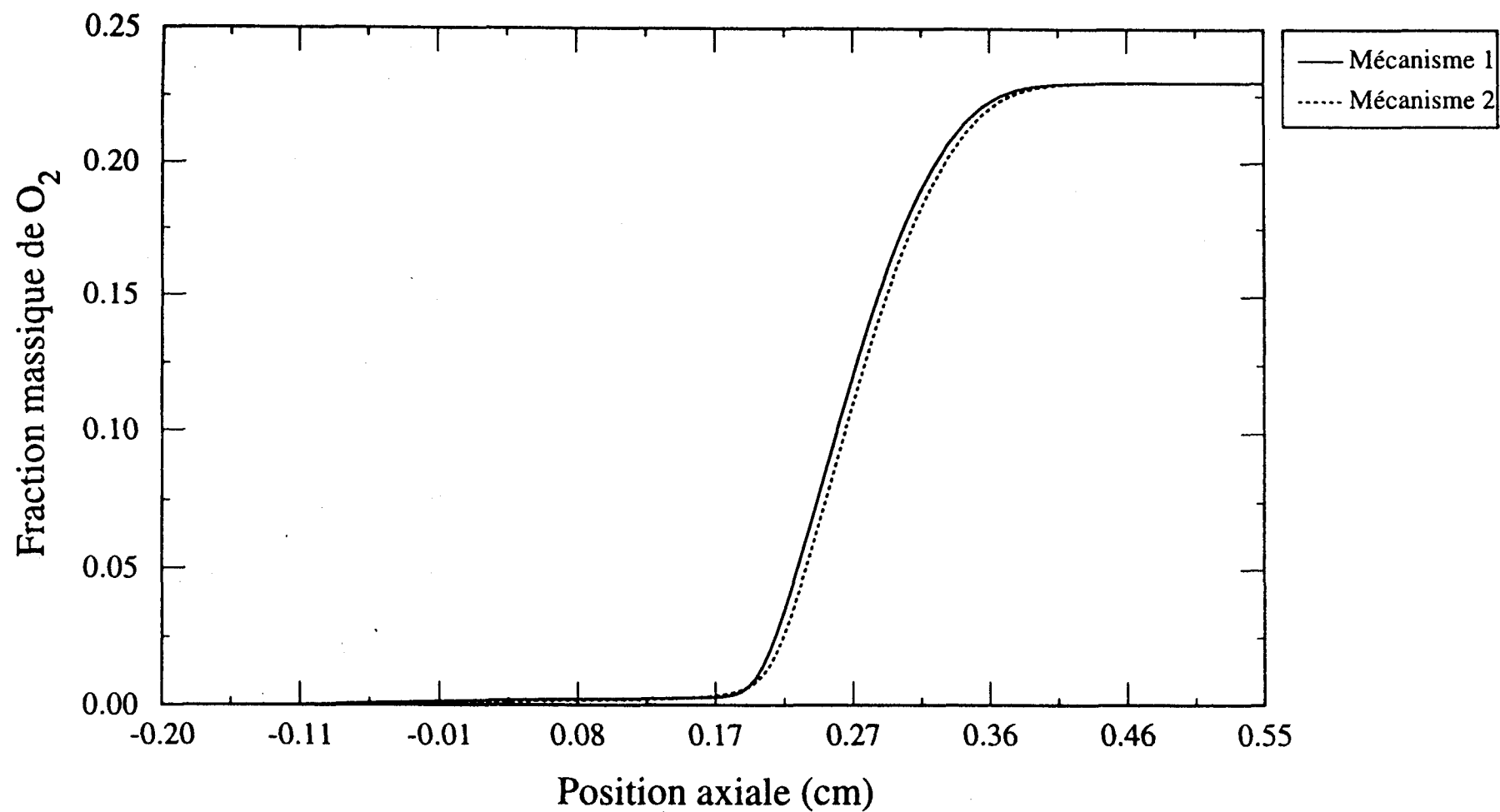


Figure (3.2e) : Comparaison des fractions massiques de  $O_2$  pour les deux schémas cinétiques.



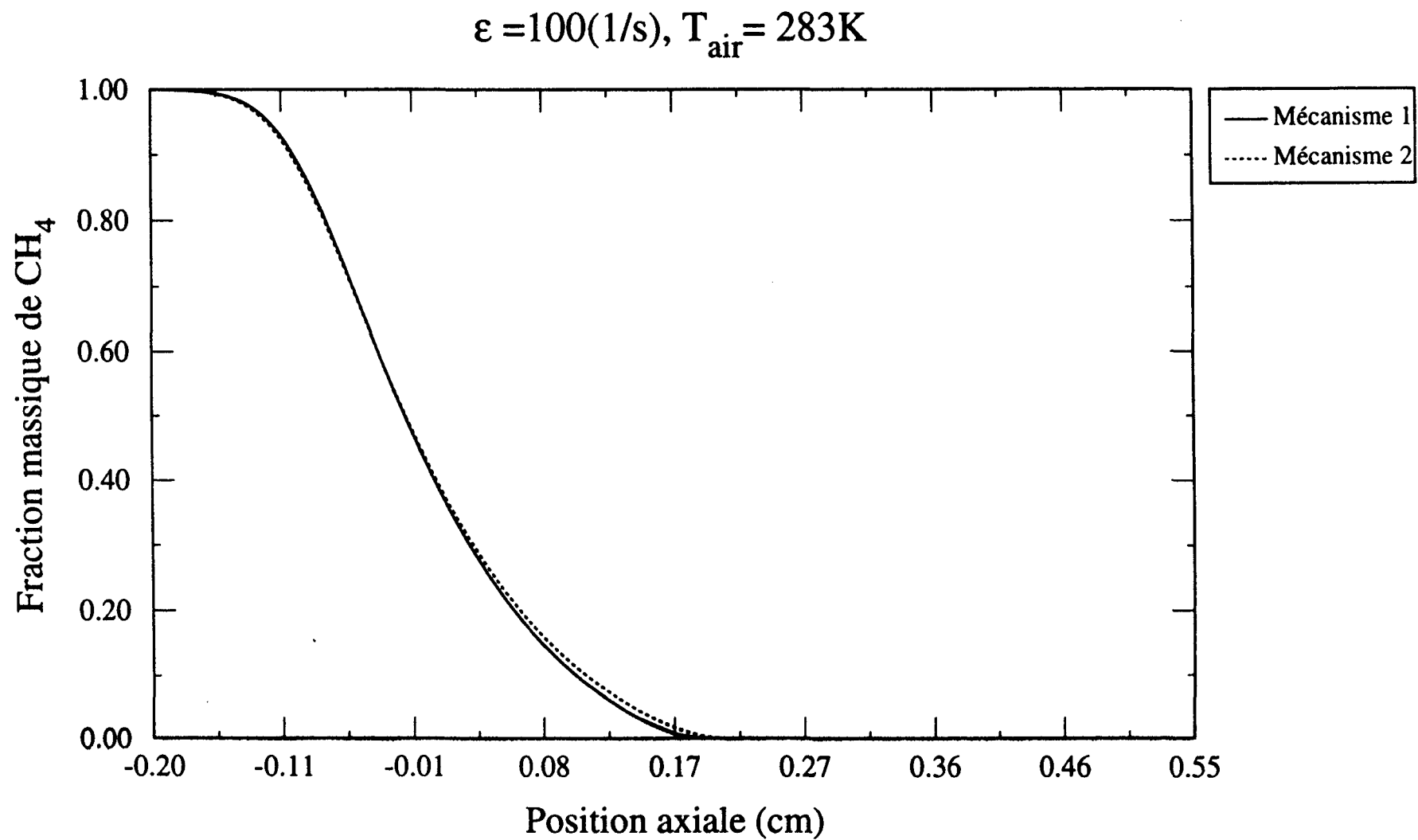


Figure (3.2f) : Comparaison des fractions massiques de  $CH_4$  pour les deux schémas cinétiques.

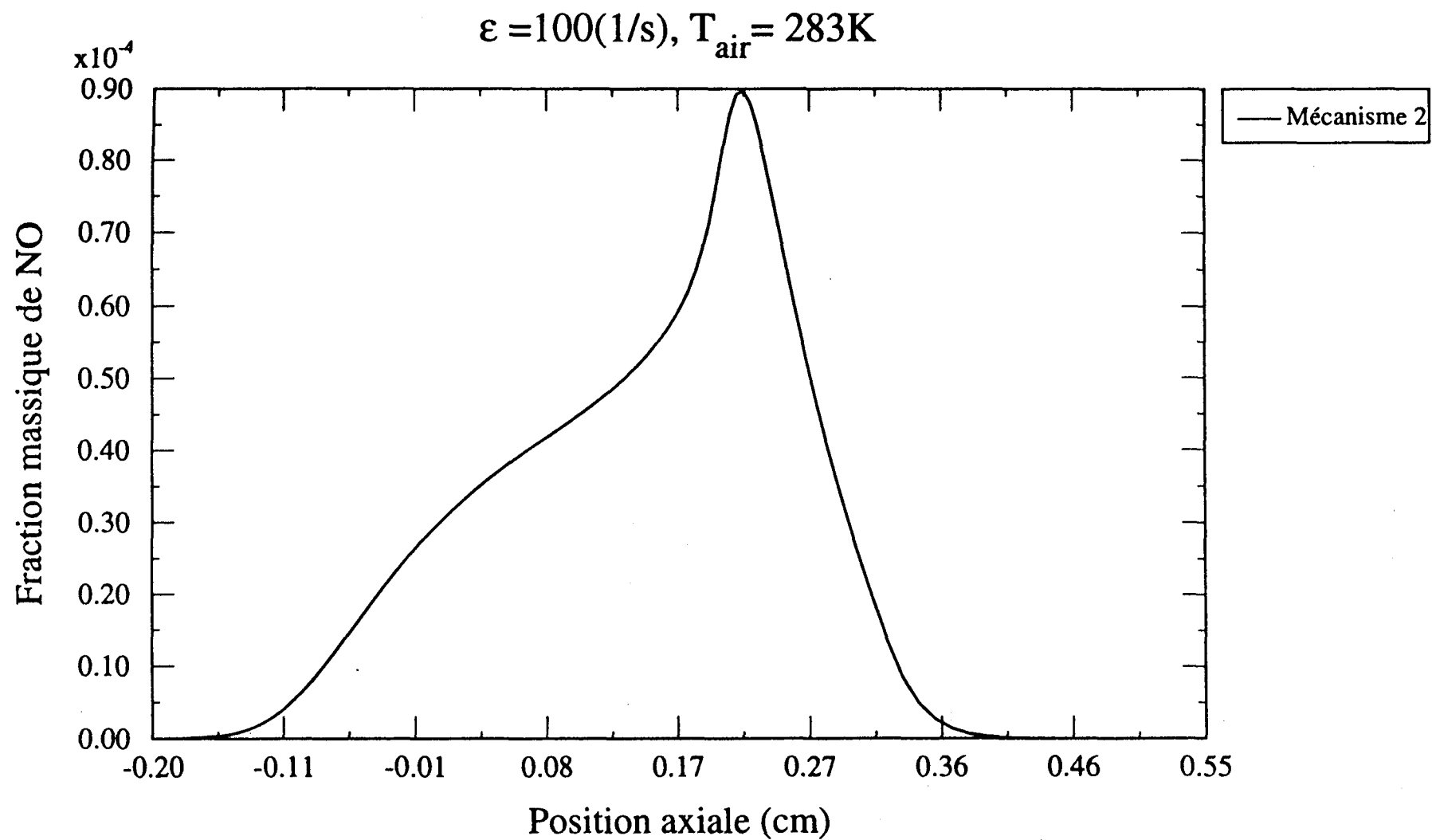


Figure (3.2g) : Comparaison des fractions massiques de *NO* pour les deux schémas cinétiques.

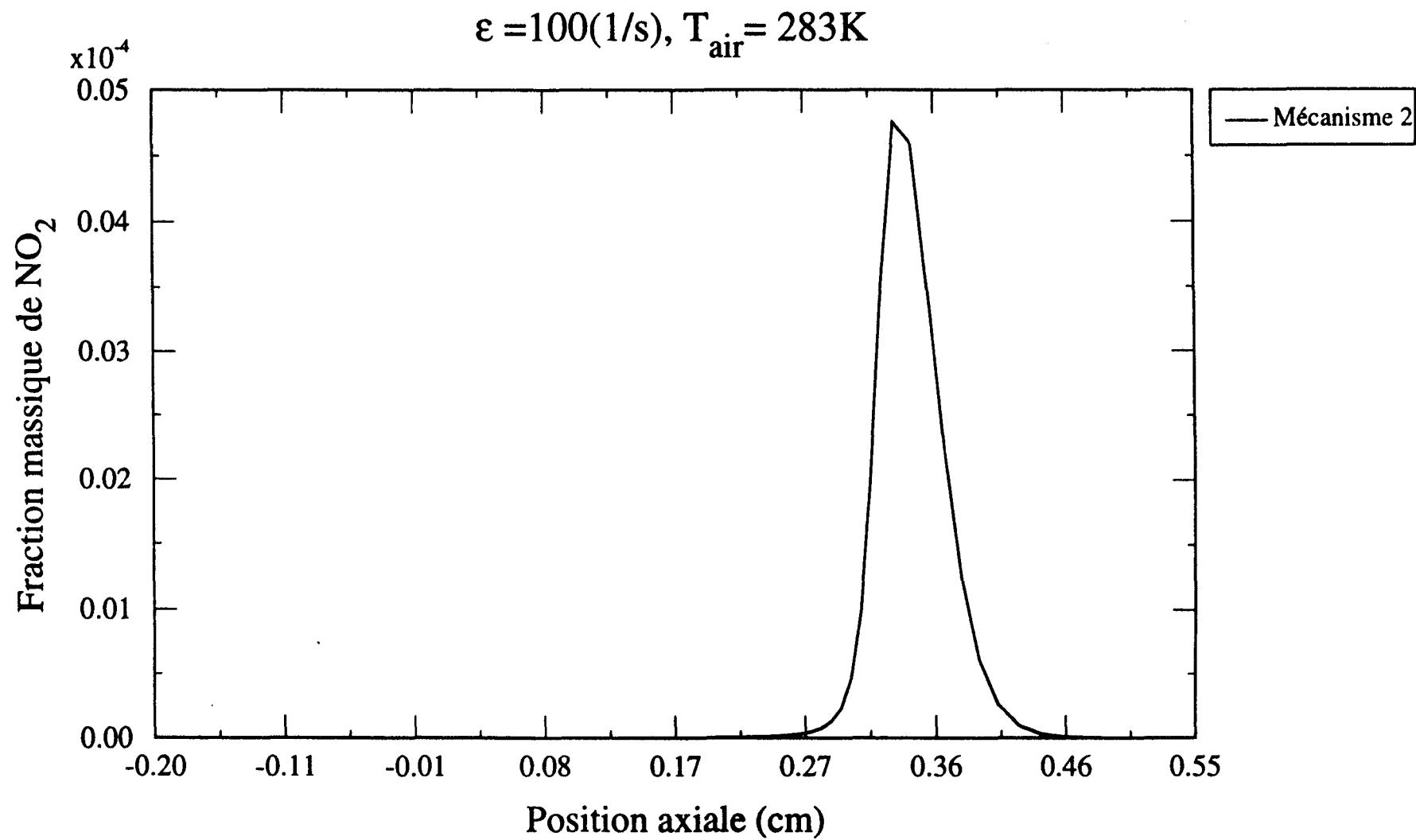


Figure (3.2h) : Comparaison des fractions massiques de  $\text{NO}_2$  pour les deux schémas cinétiques.

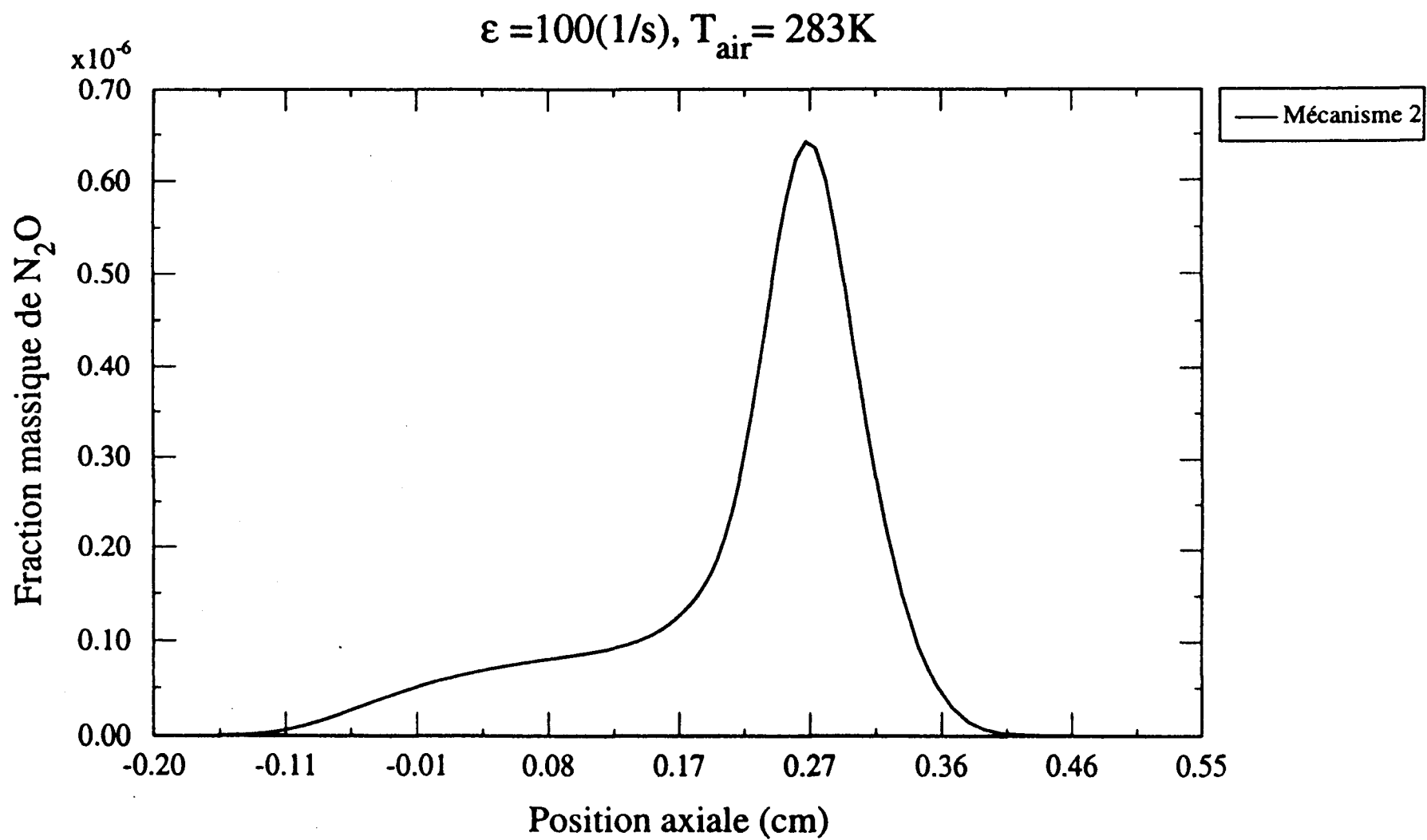


Figure (3.2i): Comparaison des fractions massiques de  $N_2O$  pour les deux schémas cinétiques.

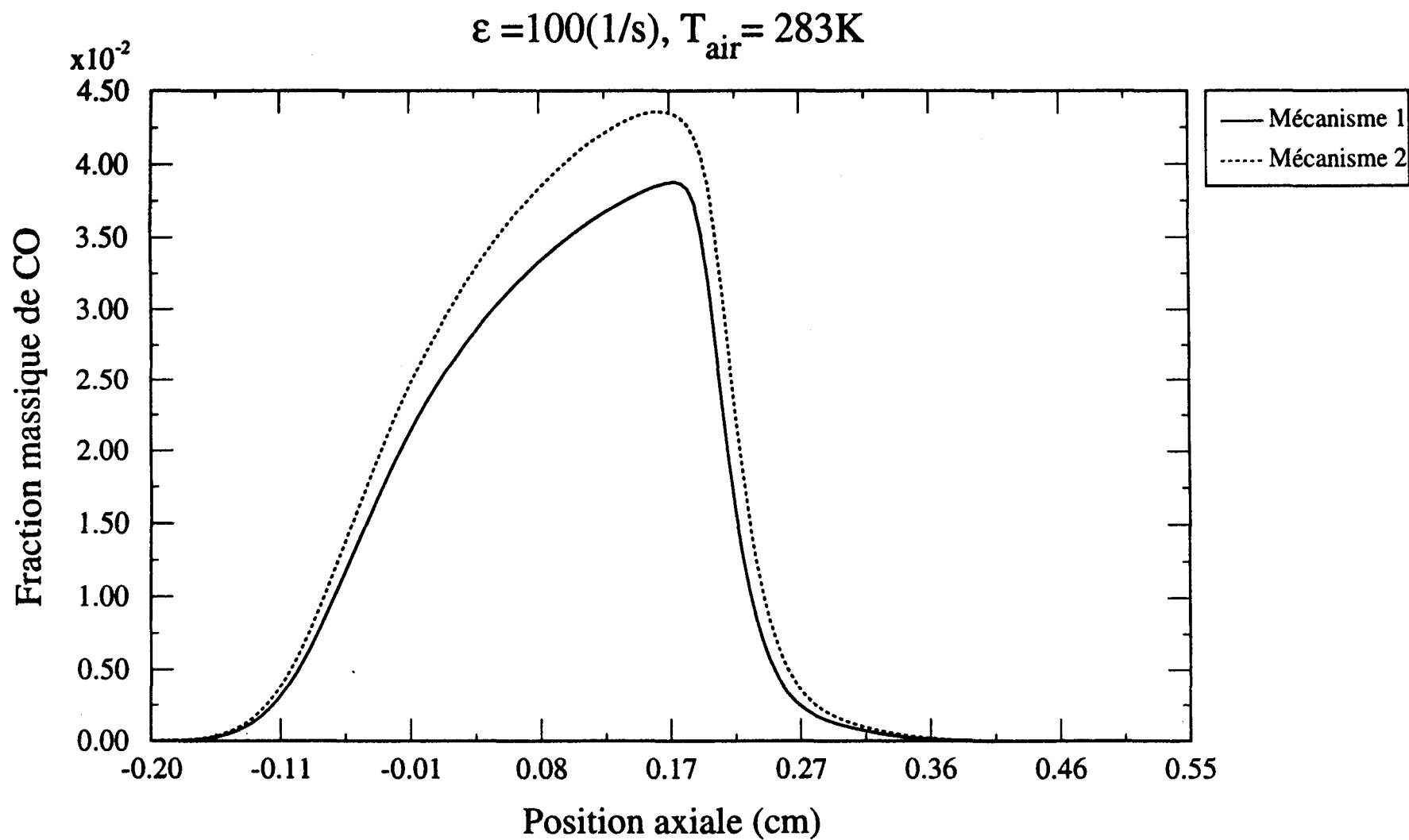


Figure (3.2j) : Comparaison des fractions massiques de *CO* pour les deux schémas cinétiques.

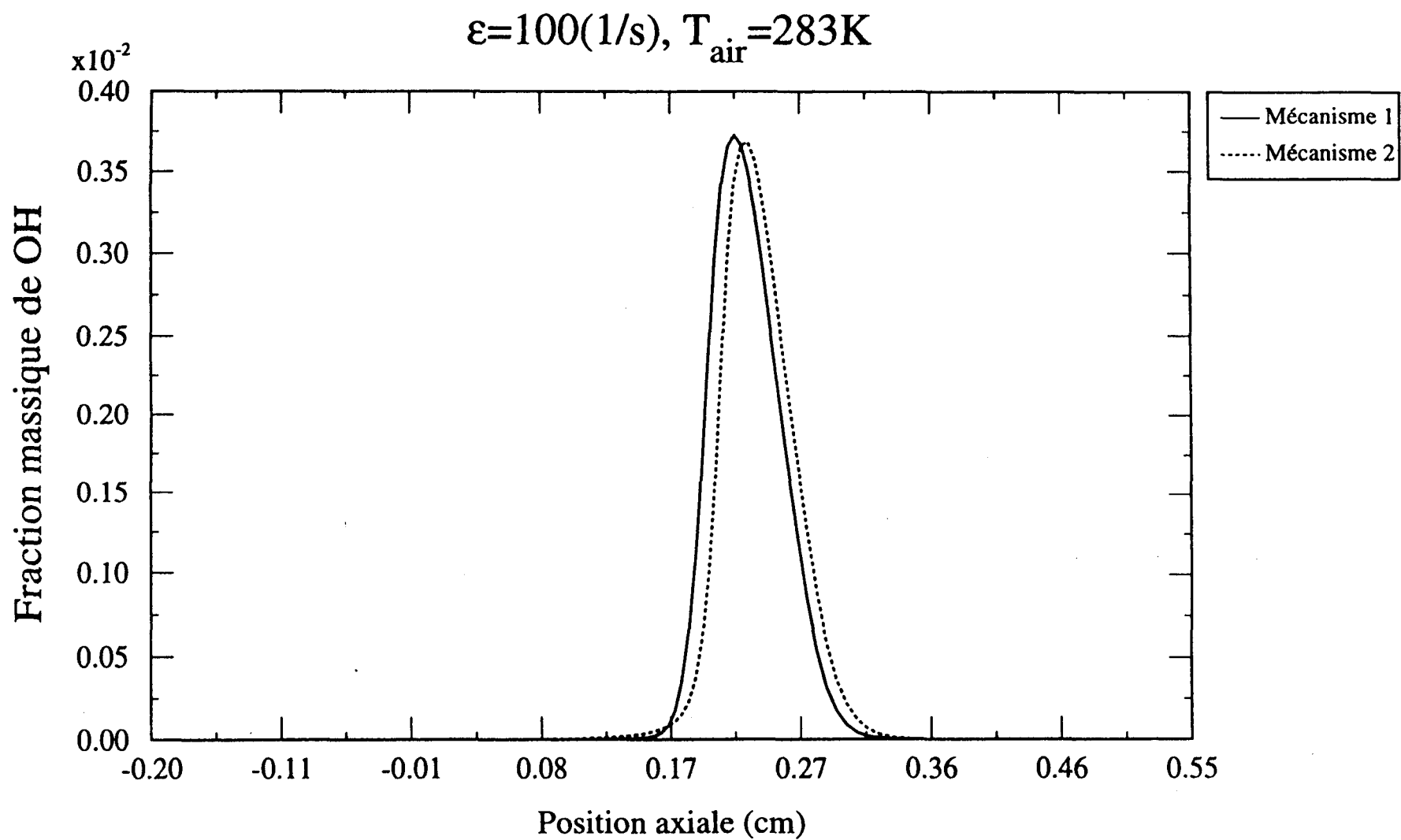


Figure (3.2k) : Comparaison des fractions massiques de  $OH$  pour les deux schémas cinétiques.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{air}} = 283K$$

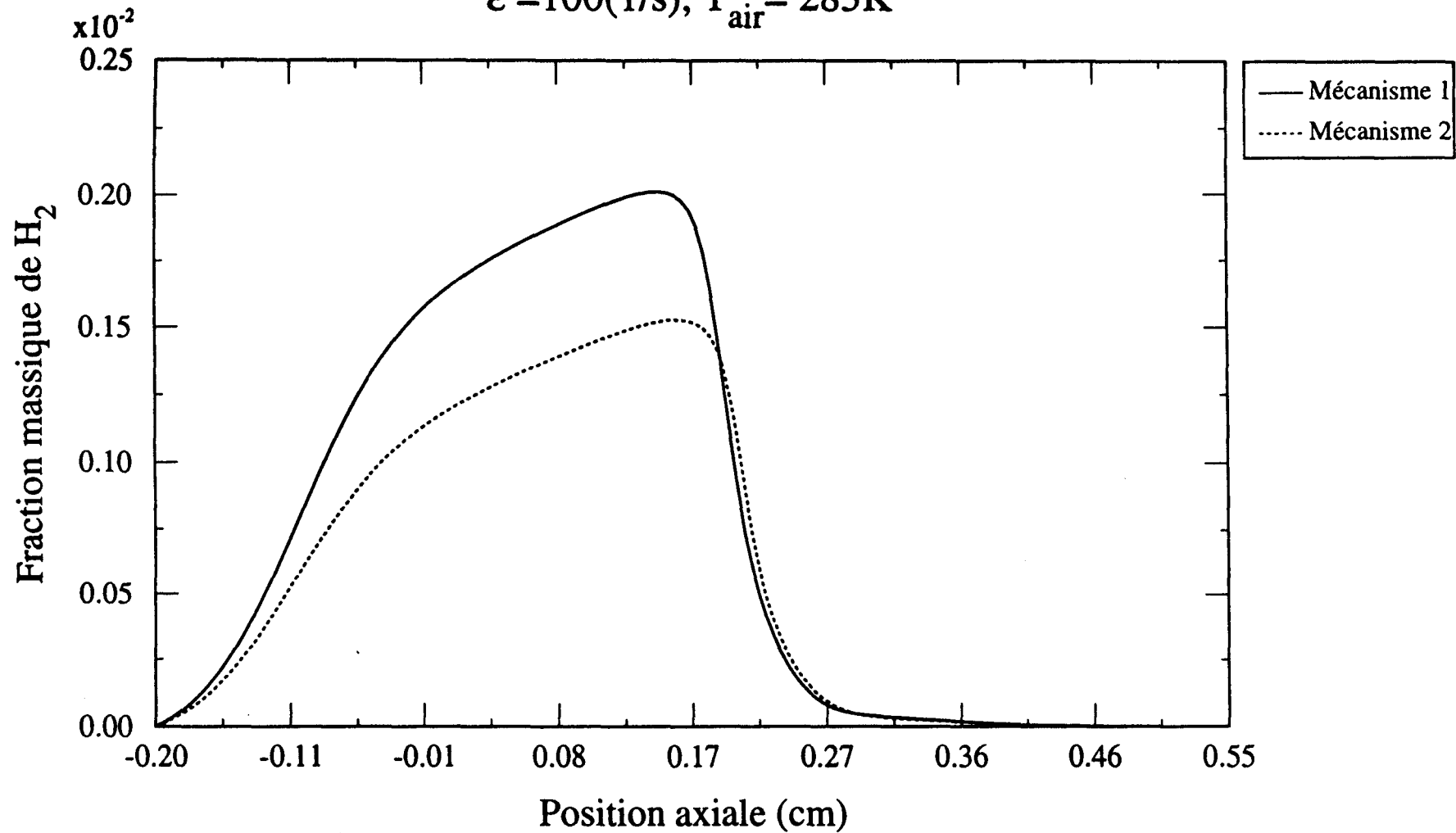


Figure (3.2l): Comparaison des fractions massiques de  $H_2$  pour les deux schémas cinétiques.

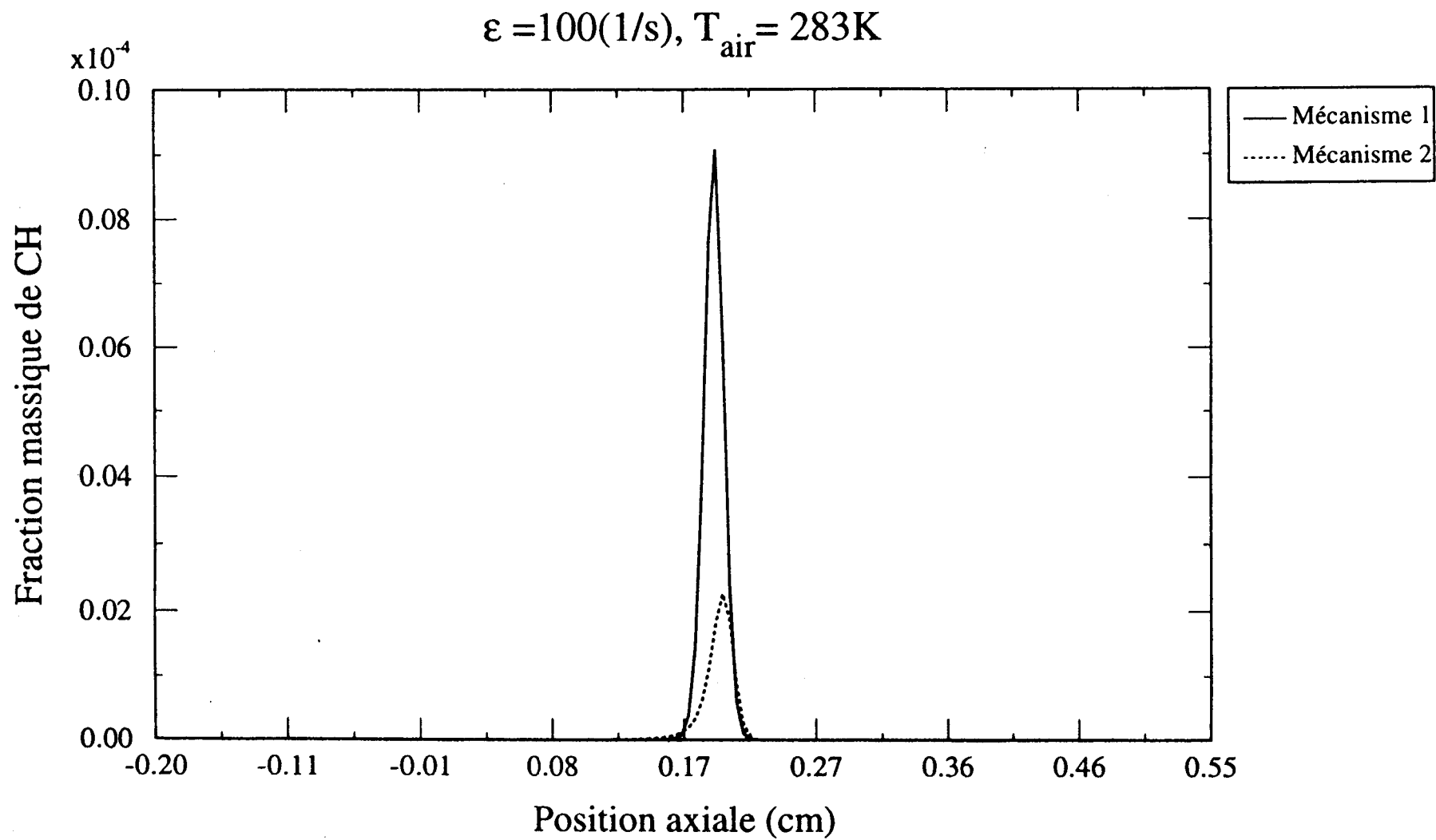


Figure (3.2*m*) : Comparaison des fractions massiques de *CH* pour les deux schémas cinétiques.



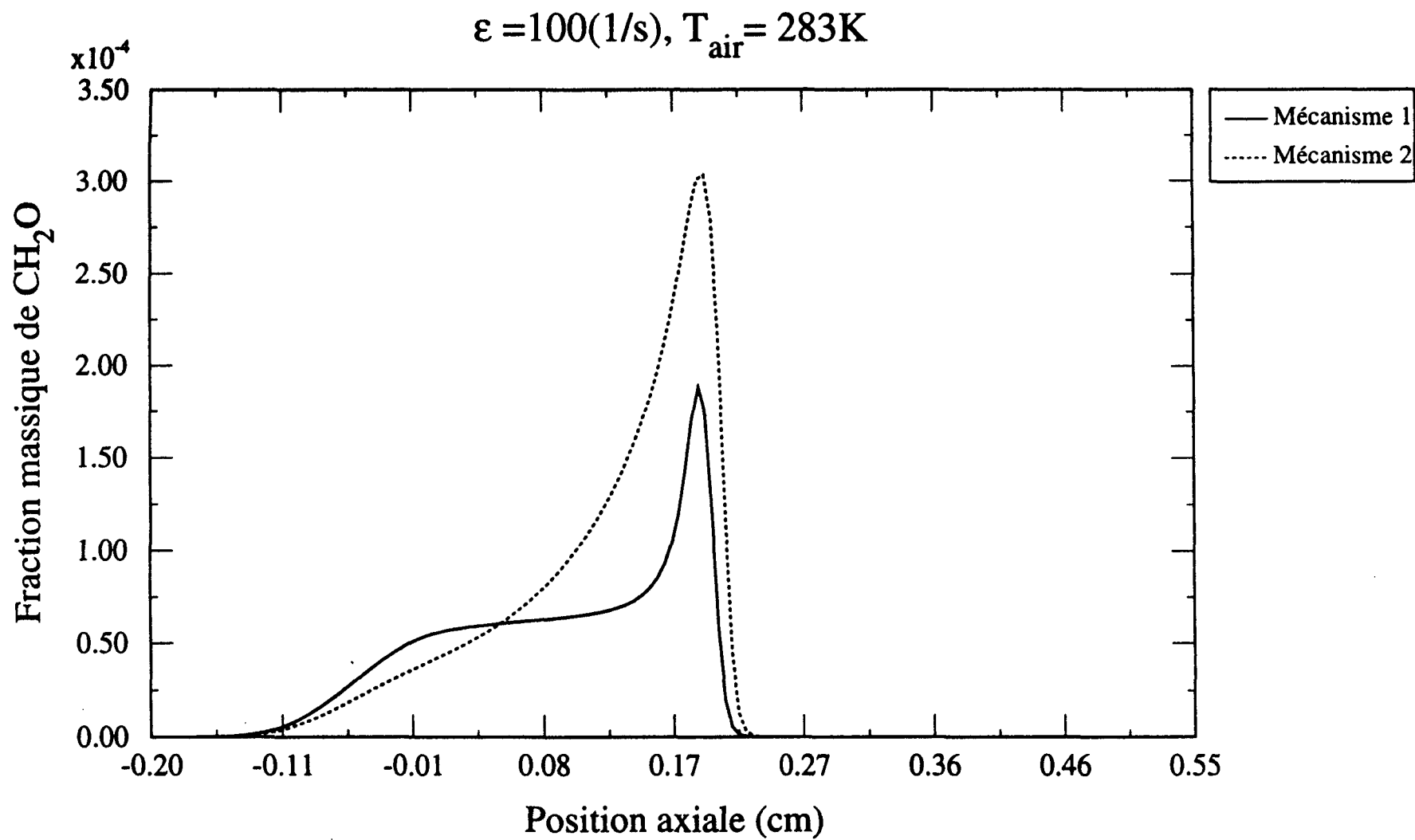


Figure (3.2n) : Comparaison des fractions massiques de  $CH_2O$  pour les deux schémas cinétiques.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{air}} = 283K$$

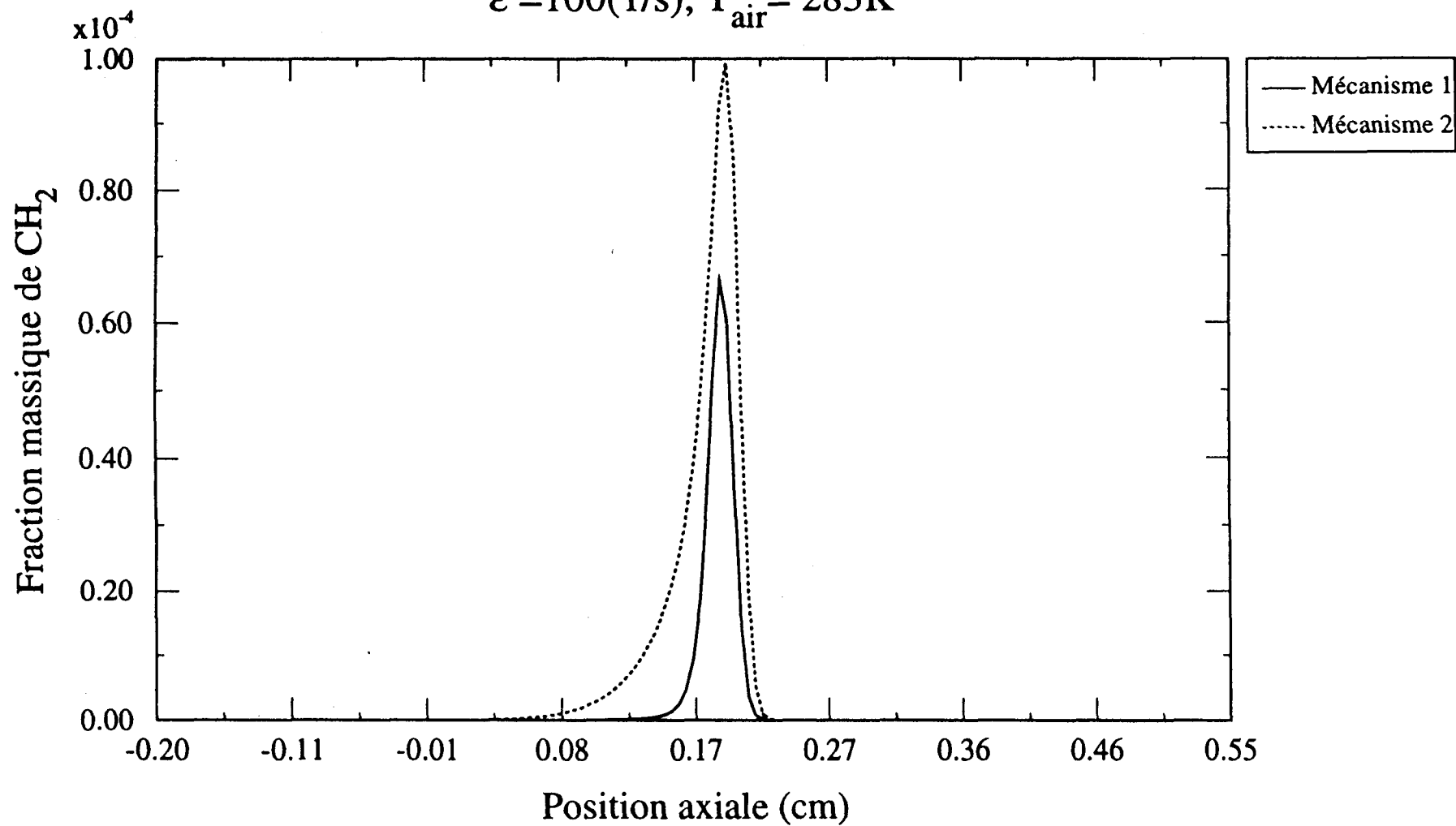


Figure (3.2.o) : Comparaison des fractions massiques du  $\text{CH}_2$  pour les deux schémas cinétiques.

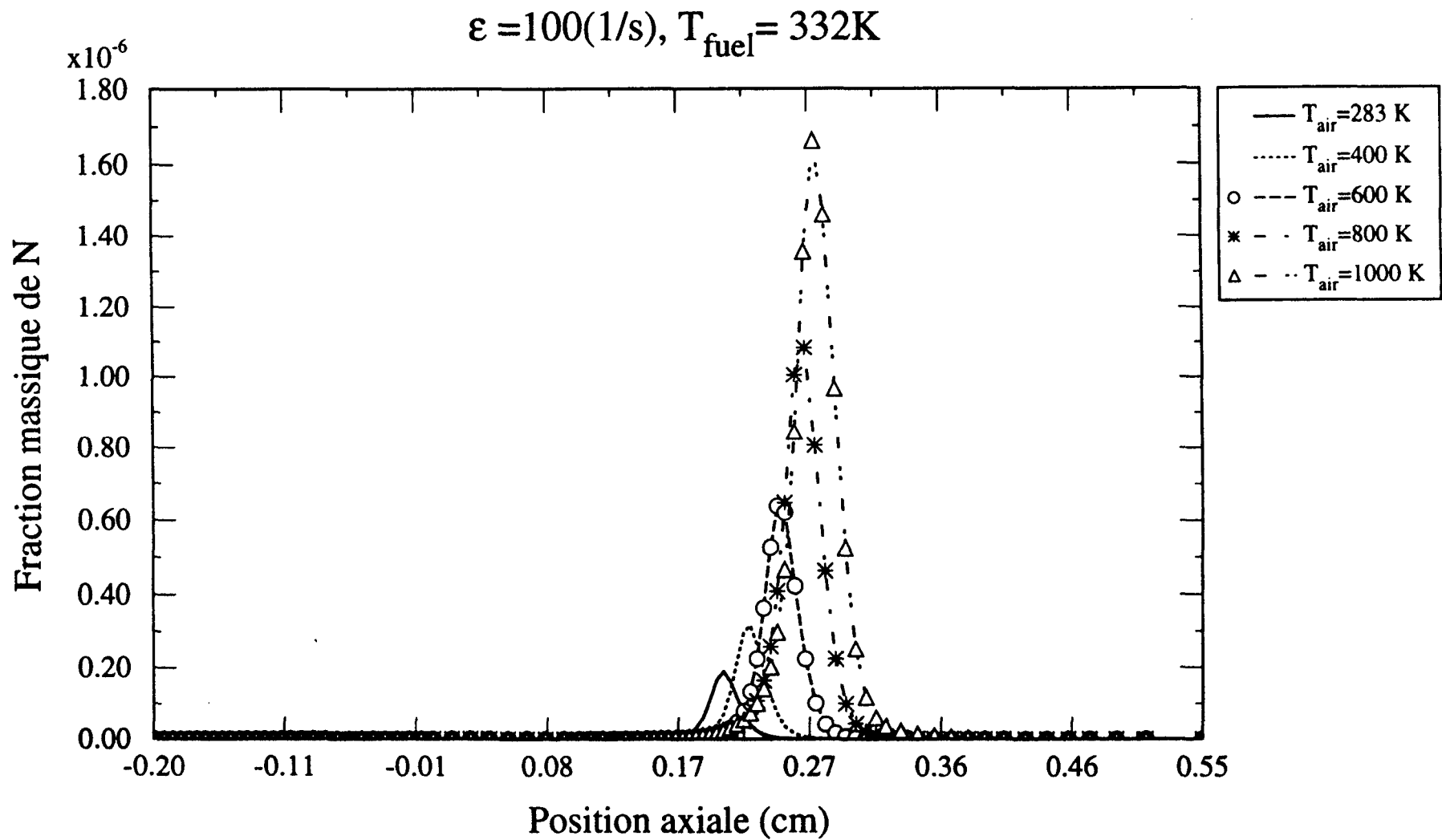


Figure (3.2.1a) : La fraction massique de N.

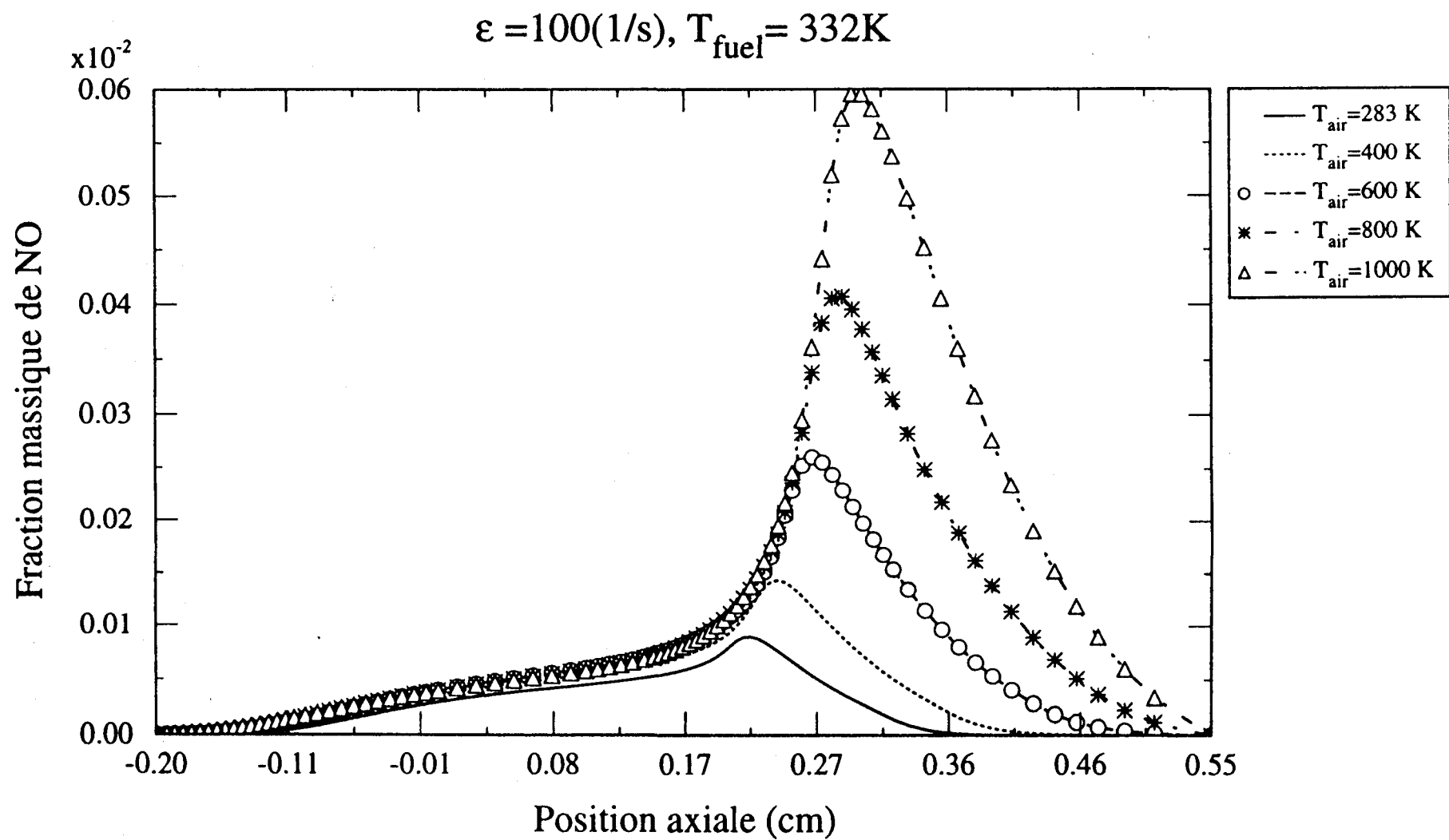


Figure (3.2.1b) : La fraction massique de NO.

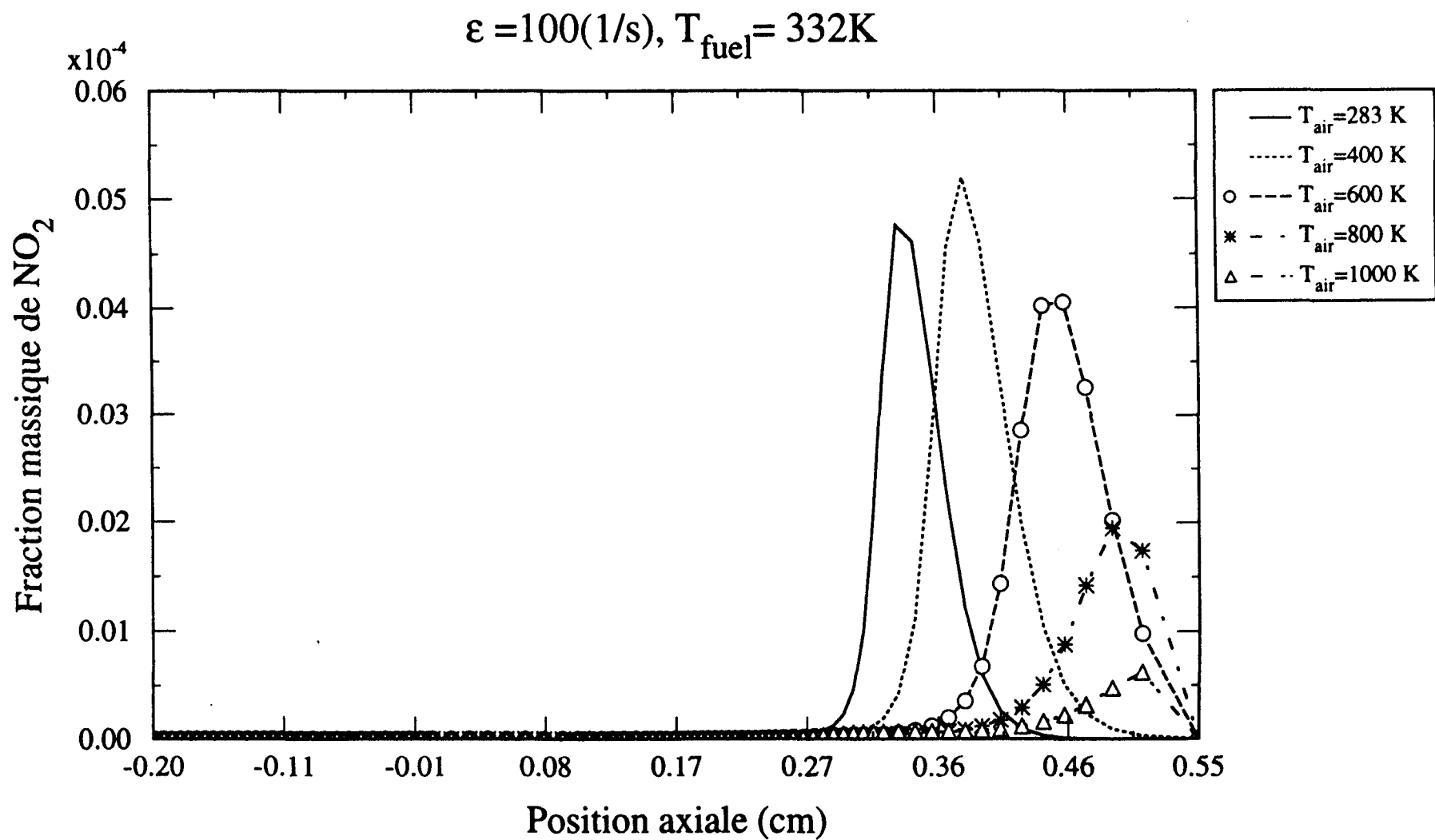


Figure (3.2.1c): La fraction massique de  $\text{NO}_2$ .

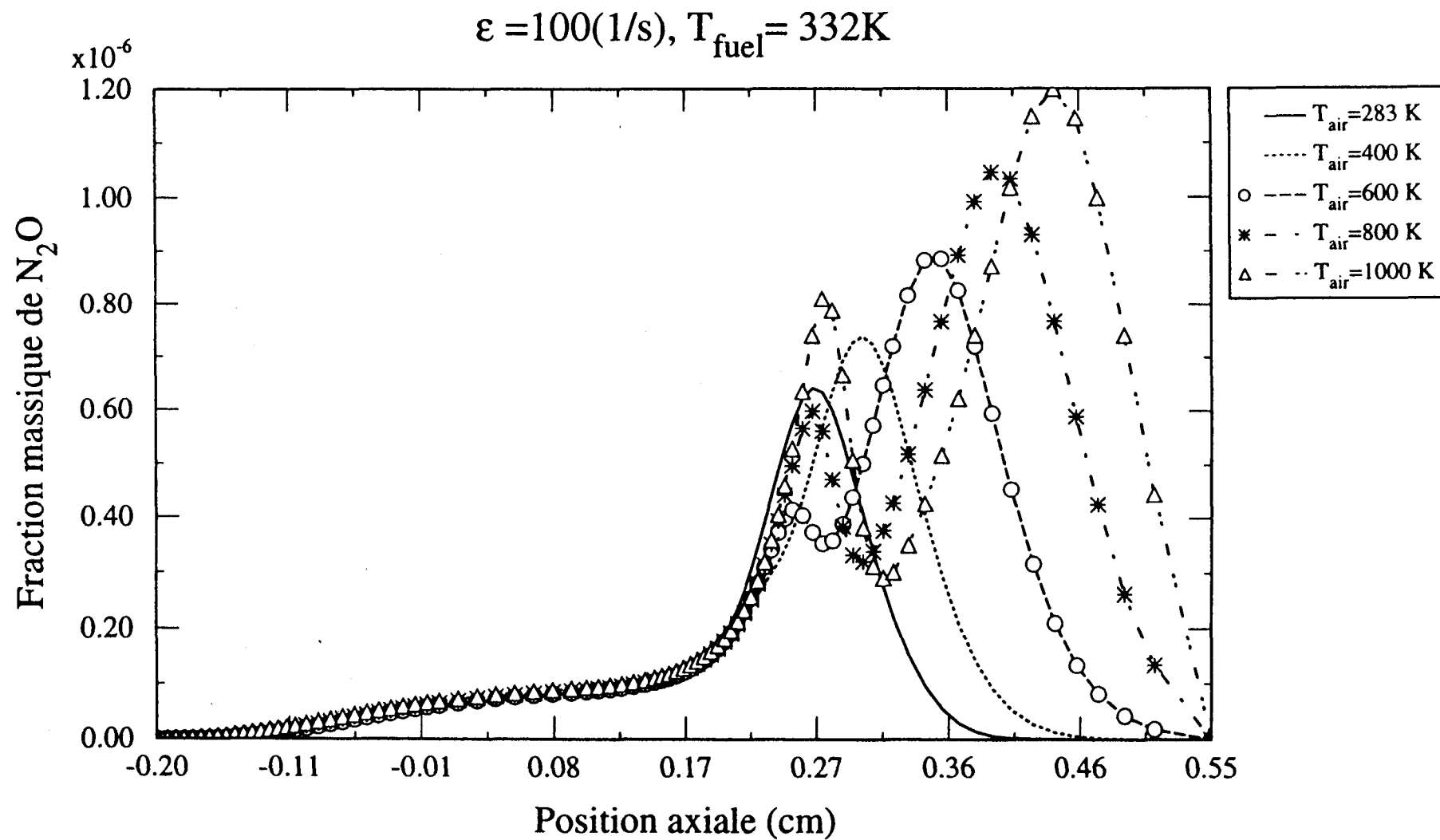


Figure (3.2.1d): La fraction massique de  $N_2O$ .

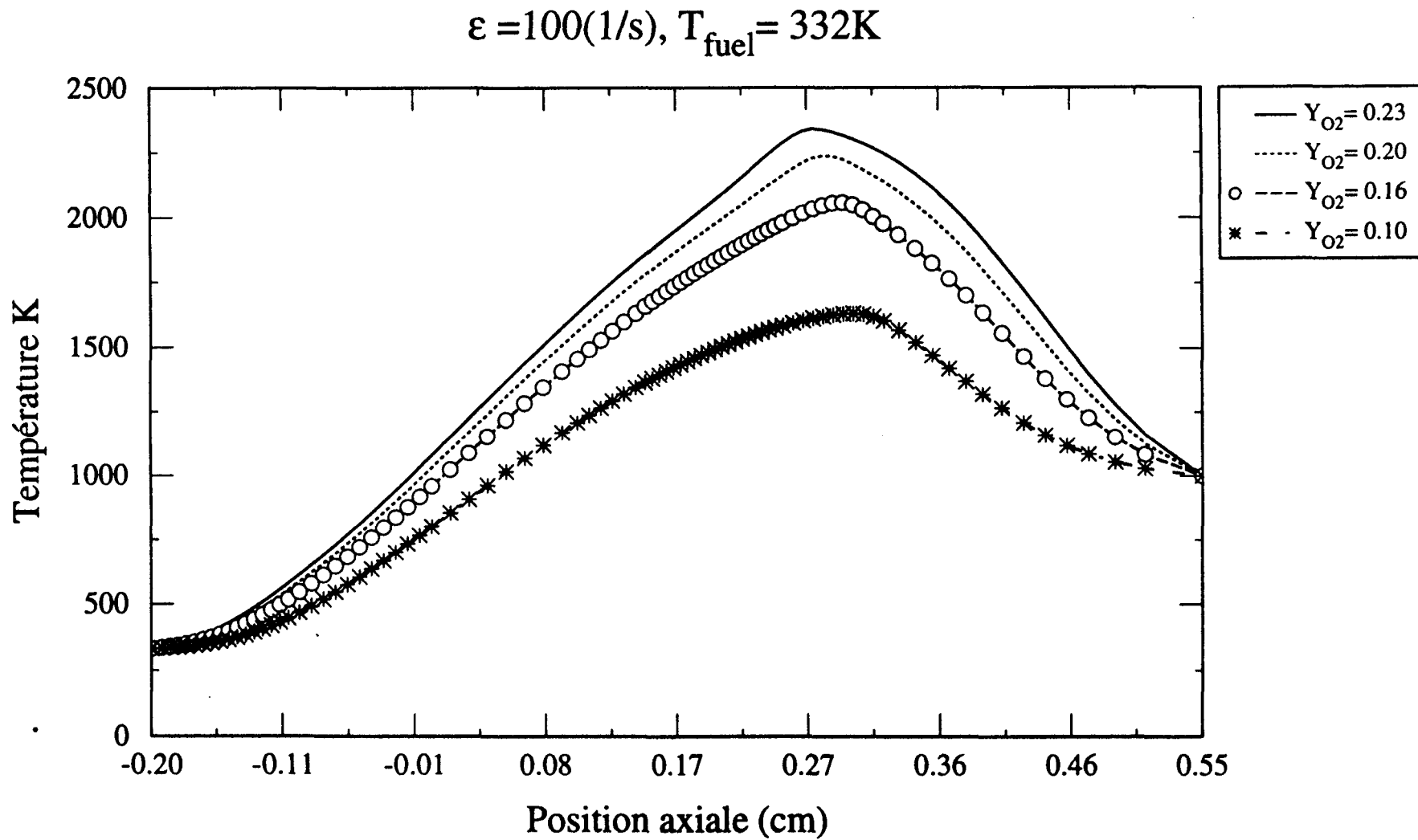


Figure (3.2.2a) : Le profil de température de fin de combustion pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{fuel}} = 332K$$

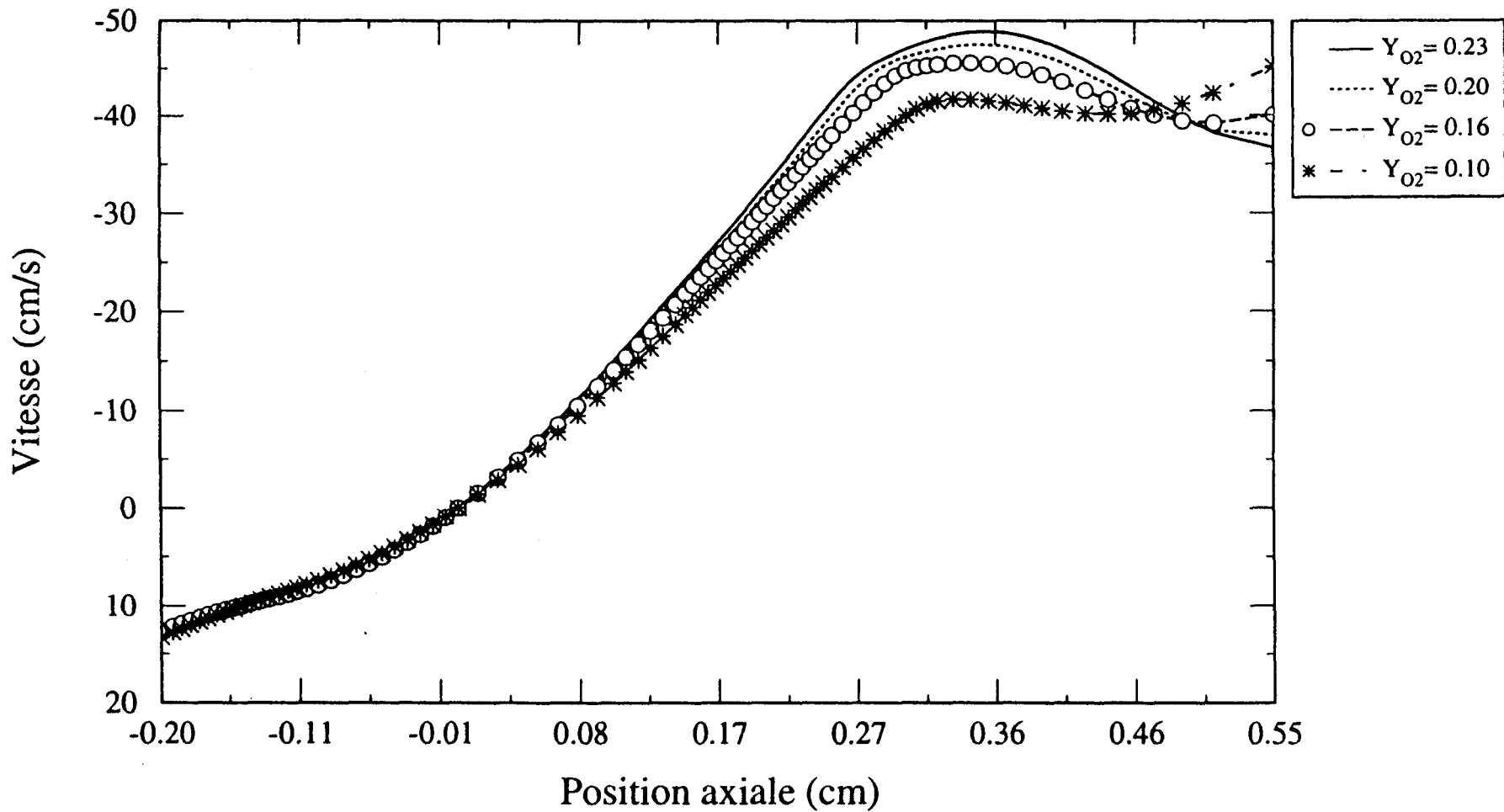


Figure (3.2.2b) : Le profil de vitesse axiale pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.



$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{fuel}} = 332K$$

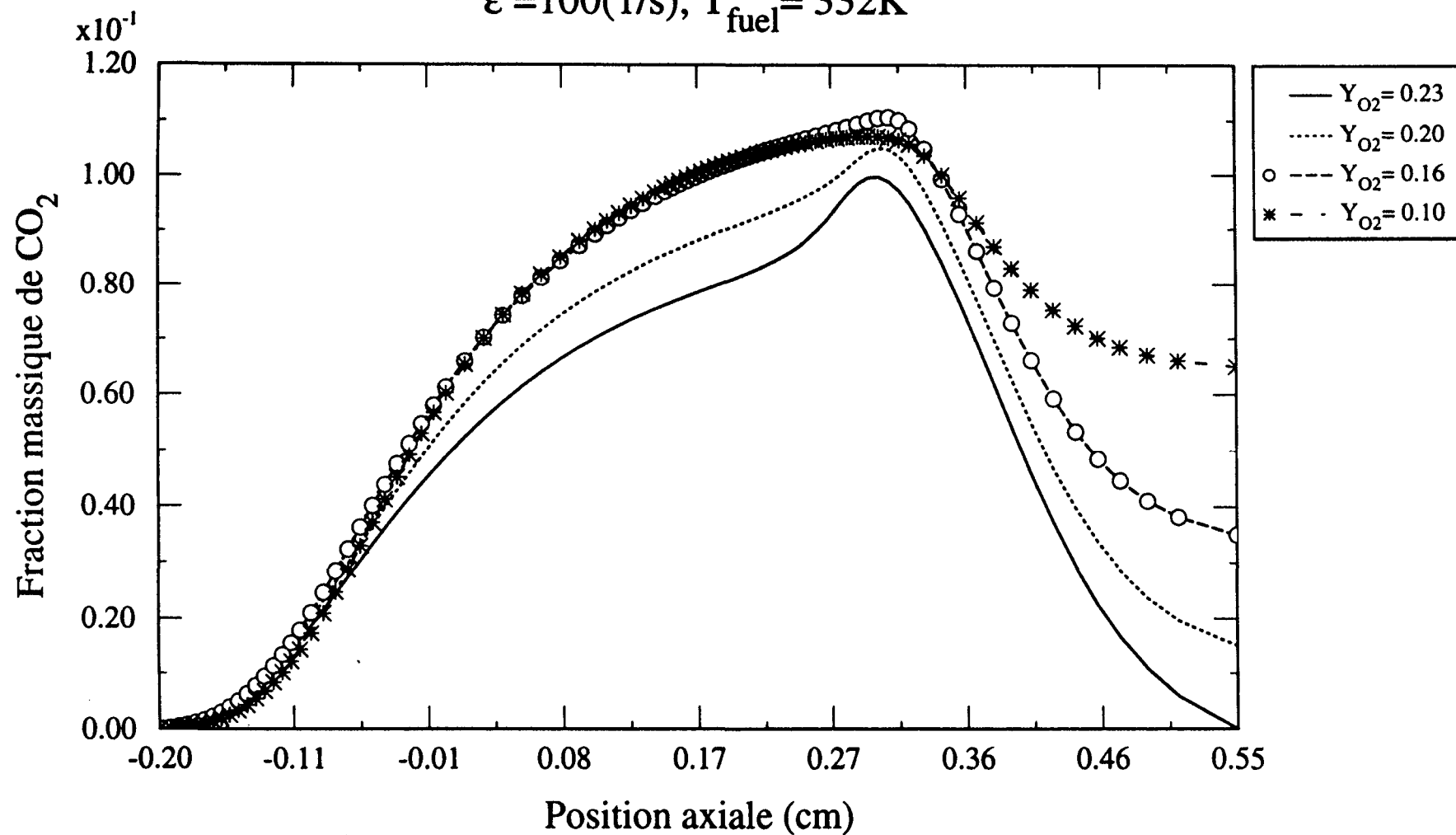


Figure (3.2.2c) : La fraction massique de  $\text{CO}_2$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

$$\varepsilon = 100(1/s), T_{\text{fuel}} = 332K$$

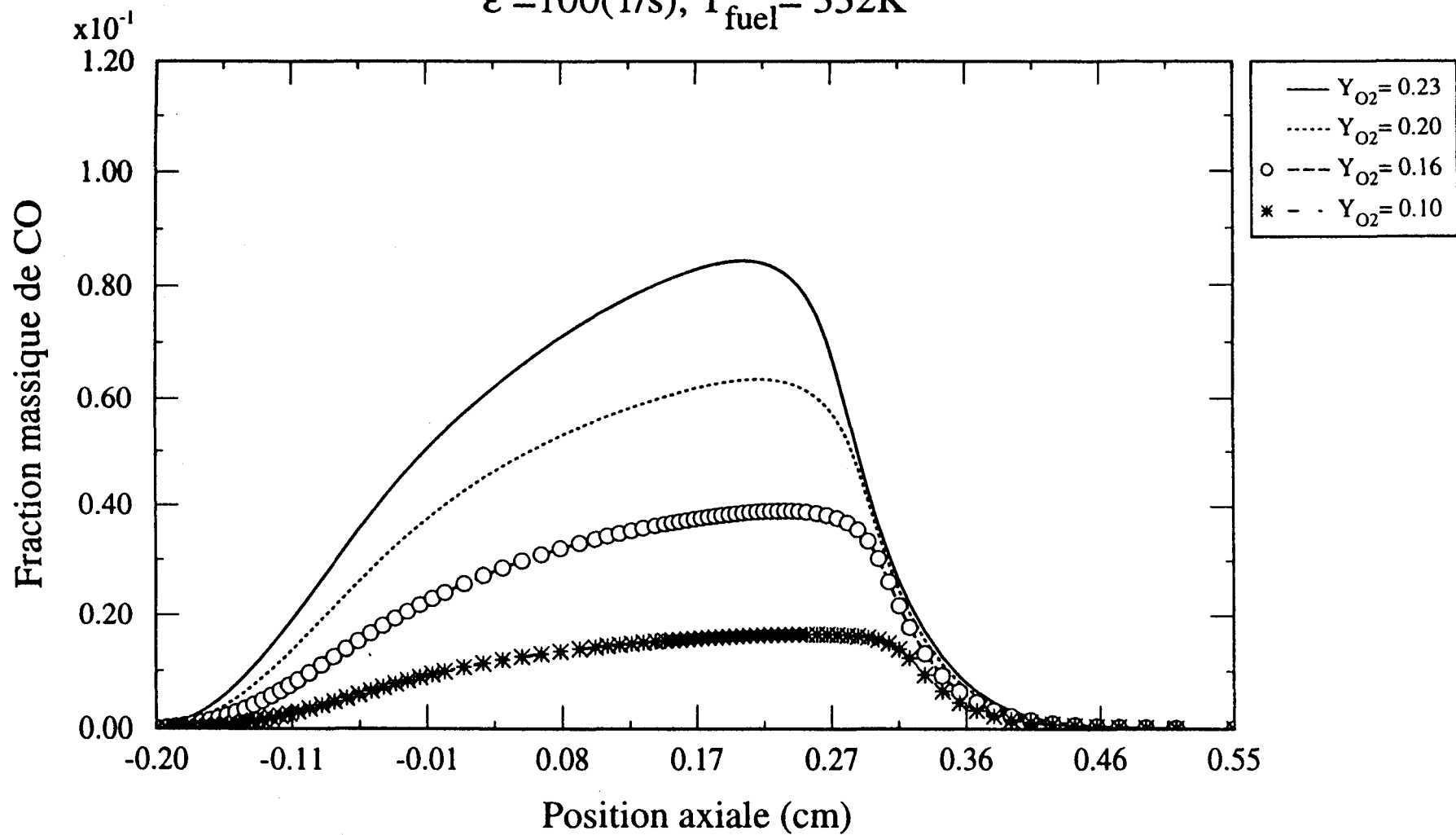


Figure (3.2.2d): La fraction massique de CO pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

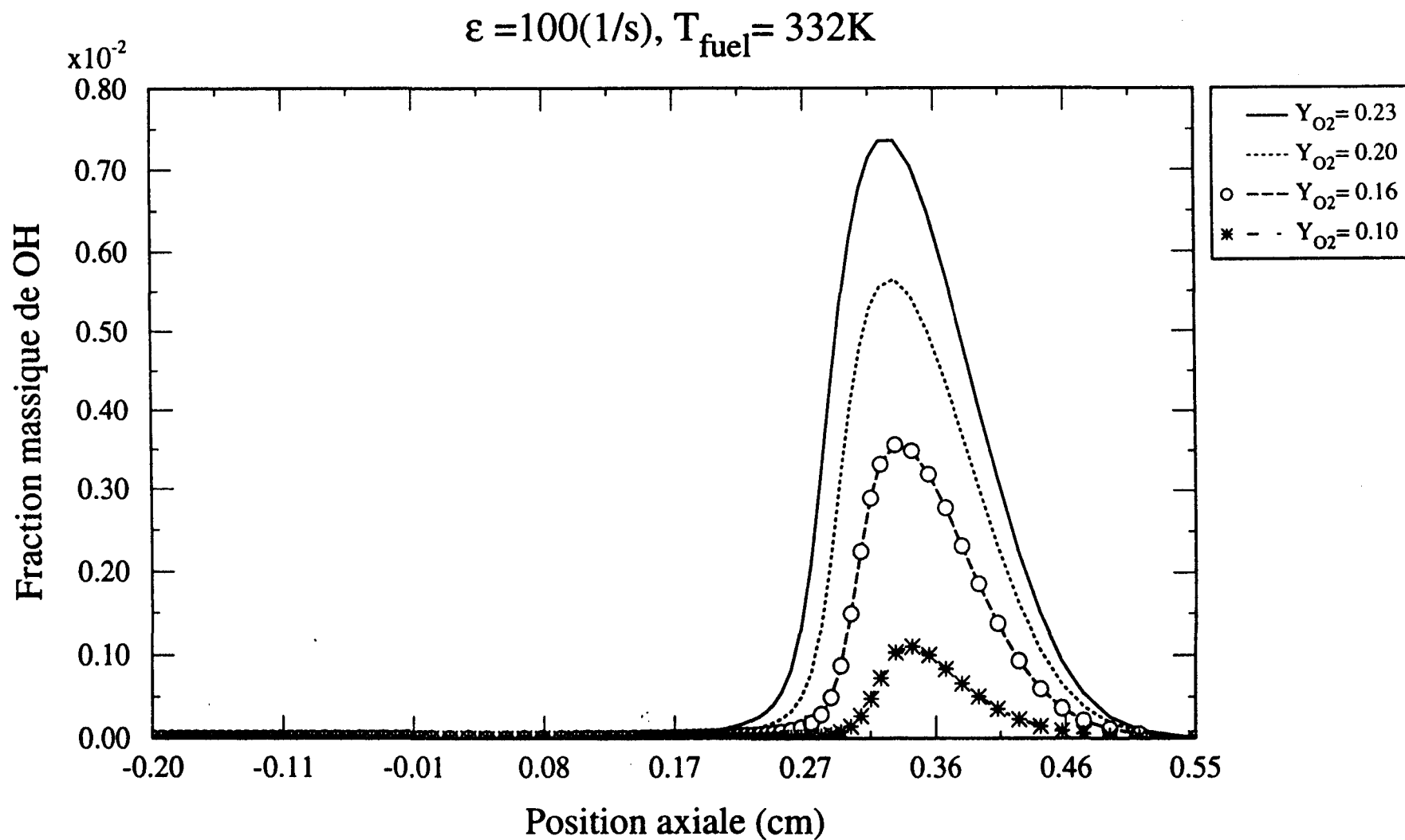


Figure (3.2.2e): La fraction massique de  $OH$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

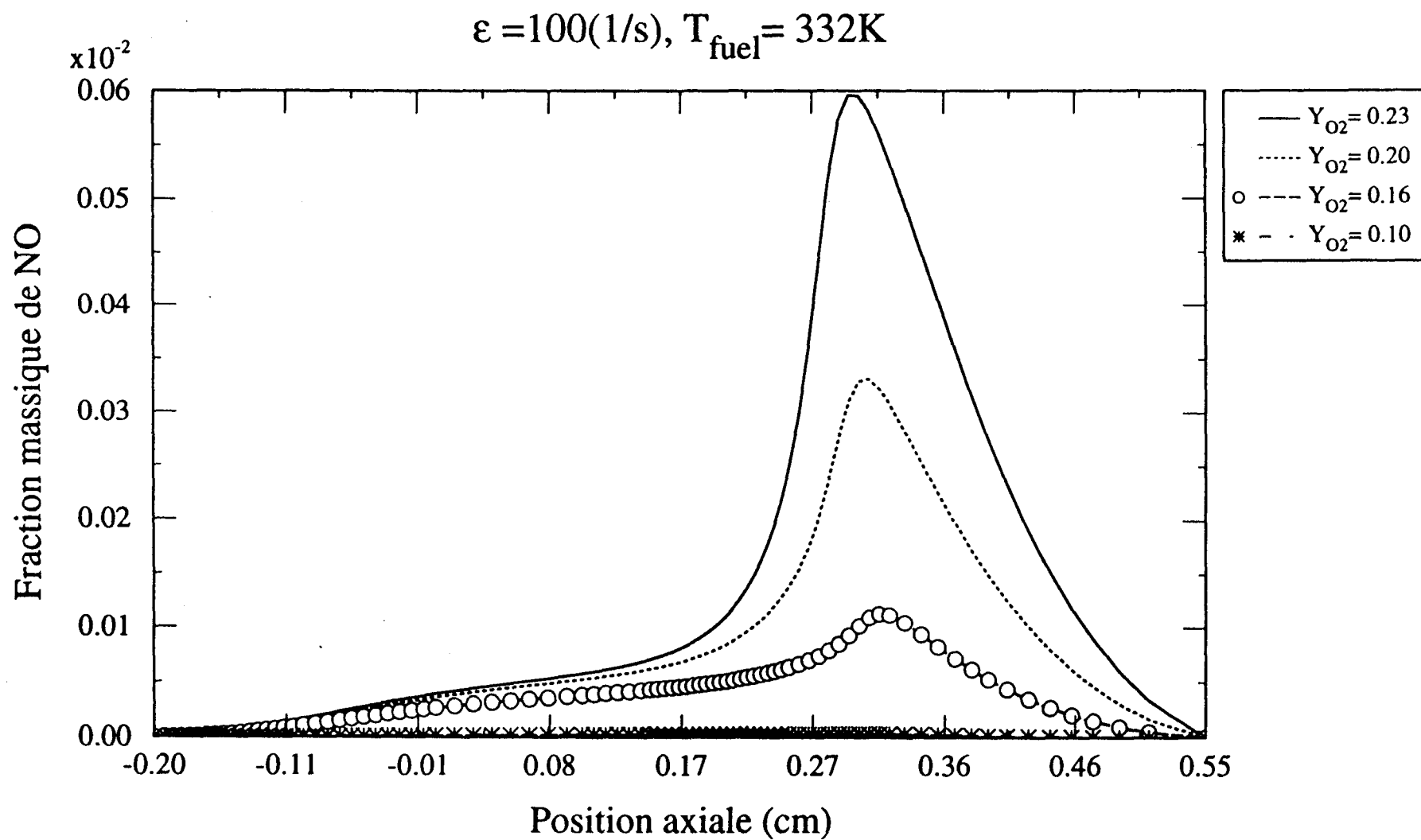


Figure (3.2.2f) : La fraction massique de *NO* pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

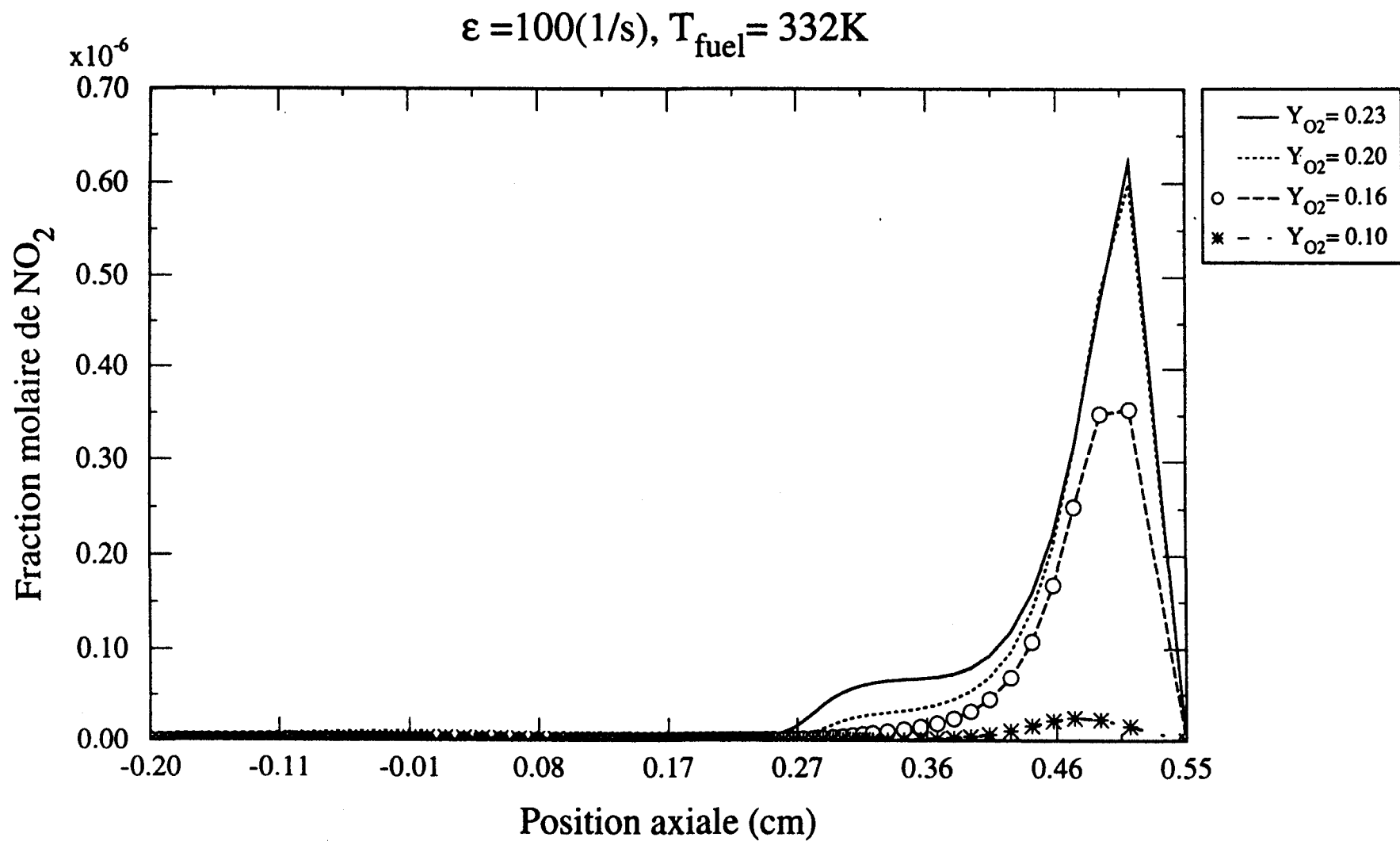


Figure (3.2.2g) : La fraction massique de  $\text{NO}_2$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.

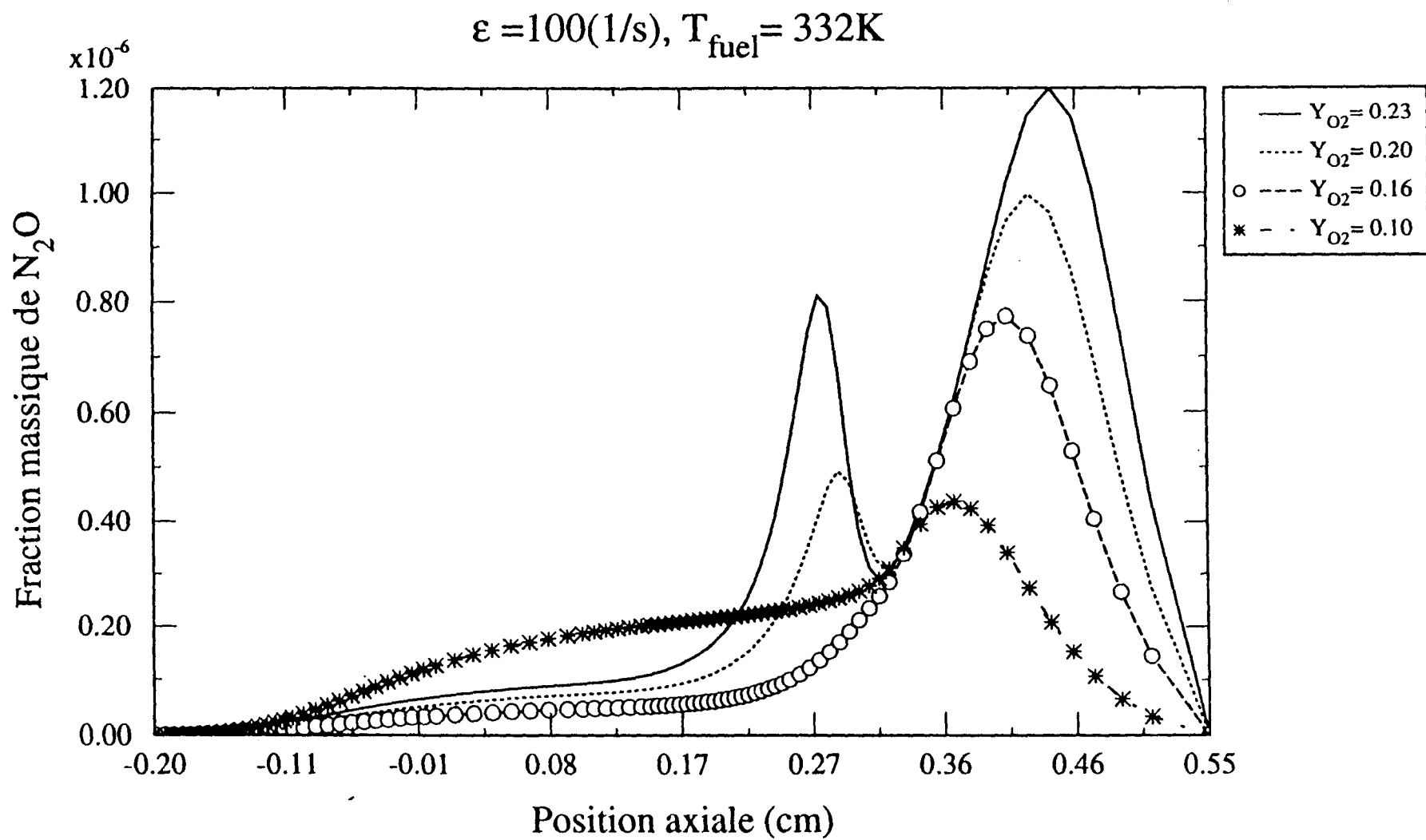


Figure (3.2.2h) : La fraction massique de  $N_2O$  pour différentes fractions massiques d'oxygène dans l'air frais.