

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE DES FRERES MENTOURI CONSTANTINE 1**

**FACULTE DES SCIENCES EXACTES**

**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

**N° d'ordre : 18/DS/2017**

**Série : 05/PHY/2017**

**THESE**

**PRESENTEE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE DOCTORAT EN SCIENCES**

**SPECIALITE : PHYSIQUE ENERGETIQUE**

**THEME**

**ETUDE PARAMETRIQUE DE LA COMBUSTION DU  
METHANE ENRICHI A L'HYDROGENE**

**Par**

**Mr ZIANI Lotfi**

**Soutenu le 22/02/2017**

**Devant le jury:**

<b>Président :</b>	<b>M.DJEZZAR</b>	<b>Pr.</b>	<b>Univ.des frères Mentouri Constantine1</b>
<b>Rapporteur :</b>	<b>A.CHAKER</b>	<b>Pr.</b>	<b>Univ.des frères Mentouri Constantine1</b>
<b>Examineur :</b>	<b>H.BENMOUSSA</b>	<b>Pr.</b>	<b>Univ. Batna 2</b>
<b>Examineur :</b>	<b>A.BENZAOU</b>	<b>Pr.</b>	<b>Univ. Houari Boumédiène Alger</b>
<b>Examineur :</b>	<b>B.DRAOUI</b>	<b>Pr.</b>	<b>Univ.Tahri Mohamed Béchar</b>

# Remerciements

Mes remerciements s'adressent tout d'abord à ma directrice de thèse, le **Professeur Abla Chaker** de l'université des frères Mentouri Constantine1, pour son aide précieuse, ses conseils et sa patience. Je salue également son dévouement pour son travail.

Je remercie le **Professeur Djezzar Mahfoud** de l'université des frères Mentouri Constantine1, qui m'a fait l'honneur de Présider le jury de cette thèse.

J'adresse mes vifs remerciements au **Professeur Benmoussa Hocine** de l'université de Batna 2, pour avoir accepté d'examiner cette thèse et faire partie du jury.

Pour avoir bien voulu évaluer ce travail de doctorat et participer à la soutenance, je remercie chaleureusement le **Professeur Ahmed benzaoui** de l'université des sciences et de la technologie Houari & Boumédiène.

J'exprime mes sincères remerciements au **Professeur Draoui Belkacem** de l'université de Tahri Mohamed de Béchar pour avoir accepté de faire partie du jury et d'évaluer ce travail.

Enfin, je remercie toute personne qui de loin ou de près à participer au succès de cette thèse.

# Nomenclature

## Caractères latins

$A_{jj}$	: Constante de l'équation d'Arrhenius	[--]
$C_p$	: Chaleur spécifique à pression constante du mélange	[J/kg.K]
$C_{pk}$	: Chaleur spécifique à pression constante de l'espèce $k$	[J/kg.K]
$C_v$	: Chaleur spécifique à volume constant du mélange	[J/kg.K]
$C_{v,k}$	: Chaleur spécifique à volume constant $Le_k$ de l'espèce $k$	[J/kg.K]
$D_a^{fl}$	: Nombre de Damköhler	[--]
$D_k$	: Coefficient de diffusion d'une espèce $k$ dans le mélange	[m <sup>2</sup> /s]
$f_{k,j}$	: Force de volume agissant sur l'espèce $k$ dans la direction $j$	[N/s <sup>2</sup> ]
$h_k$	: Enthalpie de l'espèce $k$	[J/kg]
$h_{f,k}^o$	: Enthalpie de formation standard de l'espèce $k$	[J/kg]
$K_{jj}$	: Taux direct d'une réaction	[--]
$K_{rj}$	: Taux inverse d'une réaction	[--]
$k$	: Energie cinétique turbulente	[m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$L$	: Echelle intégrale de Kolmogorov	[m]
$Le_k$	: Nombre de Lewis de l'espèce $k$	[--]
$l_{pk}$	: Longueur caractéristique	[m]
$l_m$	: Longueur de mélange	[m]
$l_r$	: Epaisseur de la couche de réaction	[m]
$m$	: Masse totale de gaz présents dans un volume	[kg]
$m_k$	: Masse de l'espèce $k$	[kg]
$\dot{m}$	: Débit massique à l'entrée	[kg/s]
$Q_j$	: Taux d'avancement de la réaction $j$	[--]
$p$	: Pression du mélange	[Pa]
$p_k$	: Pression partielles de l'espèce $k$	[Pa]
Pr	: Le nombre de Prandtl	[--]
$R$	: Constante universelle des gaz parfaits	[J/(mole K)]
Re	: Nombre de Reynolds	[--]
$s$	: Rapport stœchiométrique de masse	[--]
$Sc_k$	: Nombre de Schmidt	[--]
$t$	: Temps	[s]
$T$	: Température	[K]
$T_{aj}$	: Température d'activation	[K]
$u_i$	: Composante de la vitesse dans la direction $i$	[m/s]

$V_{k,i}$	: Composante $i$ de la vitesse de diffusion de l'espèce $k$	[m/s]
$W$	: Masse molaire du mélange	[kg/mole]
$W_k$	: Masse molaire de l'espèce $k$	[kg/mole]
$X_k$	: Fraction molaire de l'espèce $k$	[--]
$Y_k$	: Fraction massique de l'espèce $k$	[--]
$Z$	: Fraction de mélange	[--]

### Caractères grecques

$\beta_j$	: Exposant de la température de l'équation d'Arrhenius	[--]
$\delta_{ij}$	: Symbole de Kronecker	[--]
$\eta$	: La plus petite échelle de l'écoulement	[m]
$\varepsilon$	: Taux de dissipation de l'énergie de turbulence	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\varphi$	: Richesse	[--]
$\lambda$	: Coefficient de diffusion thermique	[W/m.K]
$\mu$	: Viscosité dynamique	[kg/m.s]
$\mu_t$	: Viscosité turbulente	[kg/m.s]
$\nu'_{kj}$	: Coefficients stœchiométriques molaires de la réaction $j$	[--]
$\nu''_{kj}$	: Coefficients stœchiométriques molaires de la réaction $j$	[--]
$\dot{\omega}_k$	: Taux de réaction massique global d'une espèce $k$	[--]
$\dot{\omega}_{kj}$	: Taux de réaction massique d'une espèce $k$ pour la réaction $j$	[--]
$\tilde{\chi}_p$	: Taux de dissipation scalaire	[1/s]
$\rho$	: Densité du mélange	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_k$	: Densité de l'espèce $k$	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\sigma_{ij}$	: Tenseur de la contrainte dans le plan $i$ et les directions $j$	[N/m <sup>2</sup> ]
$\tau_{ij}$	: Tenseur des contraintes visqueuses	[N/m <sup>2</sup> ]
$\tau_t$	: Temps de mélange turbulent	[s]
$\tau_f$	: Temps caractéristique de l'écoulement	[s]
$\tau_c$	: Temps caractéristique chimique	[s]

### Indices

$k$	: Espèce $k$
st	: stœchiométrique

# Table des matières

## Introduction générale

## Chapitre I – Enrichissement du méthane a l’hydrogène

<b>1. Propriétés physiques du méthane et de l’hydrogène</b> .....	7
<b>2. Synthèse (non exhaustive) de travaux antérieurs sur le mélange (CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>)</b> .....	8
<b>2.1. Tests sur des bombes</b> .....	9
<b>2.2. Tests sur les moteurs à quatre temps</b> .....	11
<b>2.3. Tests sur turbine à gaz</b> .....	13
<b>2.4. Les bruleurs</b> .....	14
<b>3. Analyse par l’indice de Wobbe</b> .....	16

## Chapitre II – Théorie des flammes de diffusion turbulente

<b>1. Stabilisation d’une flamme de diffusion turbulente</b> .....	21
1.1. Stabilisation par la réduction de la vitesse du jet.....	21
1.2. Stabilisation avec une flamme pilote.....	21
1.3. Flamme avec auto-allumage .....	22
1.4. Stabilisation par la création d’une zone de recirculation.....	22
1.5. Stabilisation par rotationnel.....	23
<b>2. Choix des variables</b> .....	23
2.1. Variables Thermochimiques.....	24
2.2. Tenseur de viscosité.....	25
2.3. Diffusion moléculaire de chaleur et d’espèce.....	26
2.4. Cinétique chimique.....	26
<b>3. Equations de conservation</b> .....	30
3.1. Conservation de la quantité de mouvement.....	30

3.2.	Conservation de la masse et des espèces .....	30
3.3.	Equation de conservation de l'énergie.....	31
<b>4.</b>	<b>La fraction de mélange <math>z</math> .....</b>	<b>31</b>
<b>5.</b>	<b>Echelles caractéristiques de la turbulence et de la combustion .....</b>	<b>33</b>
5.1.	Echelles caractéristiques de la turbulence .....	33
5.2.	Echelles caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente .....	33
<b>6.</b>	<b>Simulation de la combustion turbulente avec les modèles RANS .....</b>	<b>34</b>
6.1.	Equations de conservation moyennées .....	34
6.2.	Fermeture des équations de conservation représentées avec la moyenne de Favre ..	36
6.2.1.	Contraintes de Reynolds $(u_i'' u_j'')$ .....	36
6.2.2.	Flux turbulents d'espèces $(u_i'' Y_k'')$ et d'enthalpie $(u_i'' h_s'')$ .....	36
<b>6.3.</b>	<b>Modèles de turbulence pour les contraintes de Reynolds .....</b>	<b>36</b>
6.3.1.	Modèle à zéro équation : modèle de longueur de mélange de Prandtl.....	37
6.3.2.	Modèle à une équation : Prandtl-Kolmogorov .....	37
6.3.3.	Modèle à deux équations : $k - \varepsilon$ .....	37
6.3.4.	Modèle $k - \varepsilon$ modifié.....	38
6.3.5.	Fermetures du second ordre (RSM) .....	38
<b>7.</b>	<b>Couplage turbulence combustion dans une flamme de diffusion turbulente .....</b>	<b>40</b>
7.1.	Modèles avec variables primitives et une chimie infiniment rapide .....	40
7.3.	Modèles avec taux moyen de réaction et une chimie infiniment rapide .....	43
7.3.1.	Le modèle <i>Eddy Break-up</i> et le modèle d' <i>Eddy Dissipation</i> .....	43
7.3.2.	<i>Eddy Dissipation Concept (EDC)</i> .....	44
7.3.3.	<i>Analyse de la structure de la flamme</i> .....	45
7.4.	Modèles avec variables primitives et une chimie à vitesse finie.....	46
7.5.	Modélisation basée sur le concept de flammelles.....	47
<b>8.</b>	<b>Choix des modèles .....</b>	<b>51</b>

## Chapitre III – Effet de l'hydrogène

<b>1.</b>	<b>Etude comparative de modèles de turbulence et de deux schémas cinétiques .....</b>	<b>56</b>
1.1.	Présentation de la configuration .....	57

<b>2. Effet de l'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulente .....</b>	<b>63</b>
<b>3. Effet de l'hydrogène sur la puissance et la production de polluants.....</b>	<b>70</b>

## **Chapitre IV – Effet de la température et de la pression**

<b>1. Configuration géométrique .....</b>	<b>75</b>
<b>2. Approches de la modélisation numérique.....</b>	<b>76</b>
<b>3. Domaine de calcul et conditions aux limites .....</b>	<b>76</b>
<b>4. Validation de la modélisation numérique .....</b>	<b>77</b>
<b>5. Effet de la pression ambiante et de la température initiale .....</b>	<b>78</b>
5.1. Effet de la pression et de la température initiale sur la structure de la flamme.....	79
5.2. Effet de la pression et de la température initiale sur les fractions massique de CO et de NO .....	91

## **Conclusion générale**

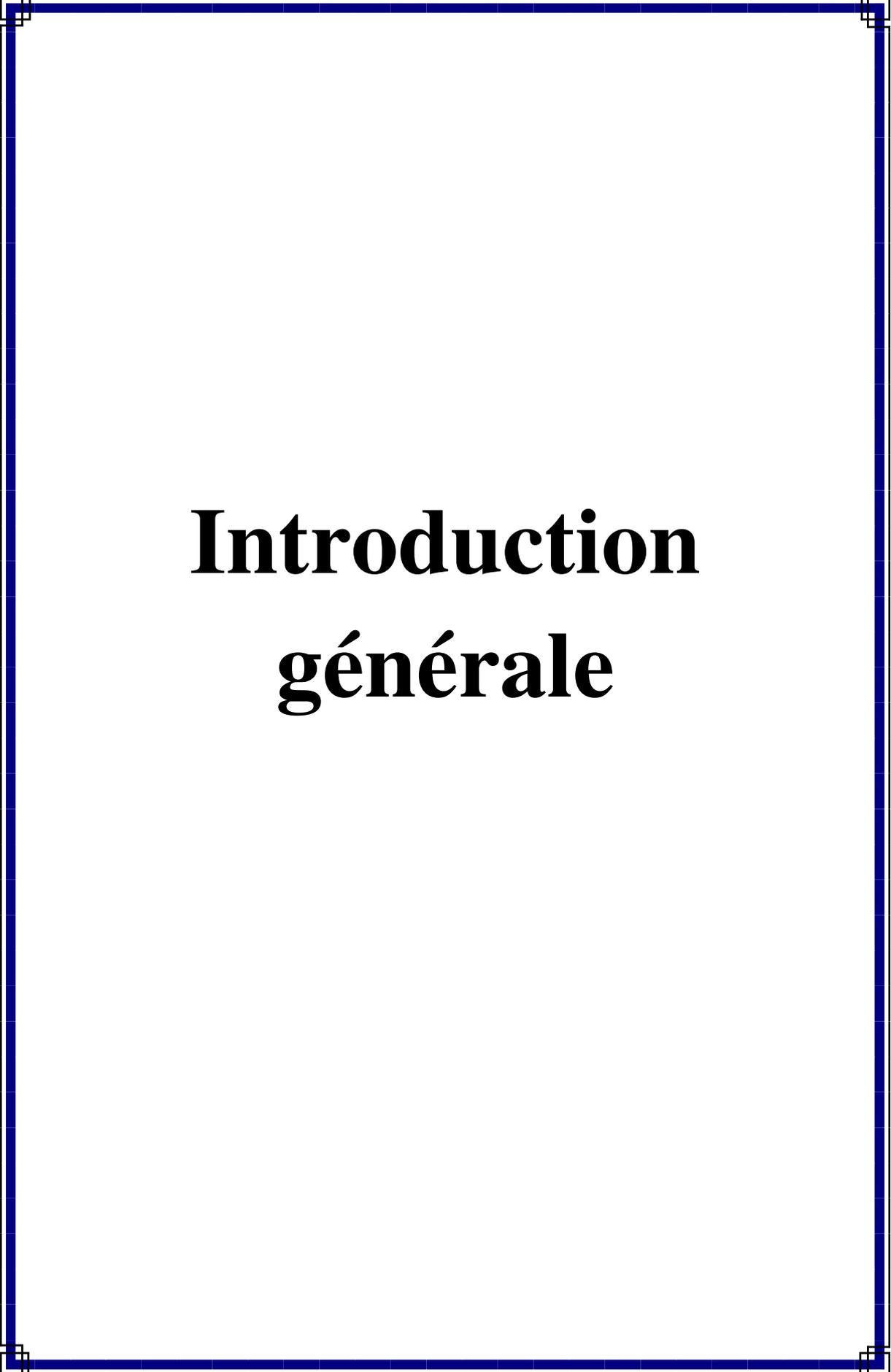
## **Annexe A – Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0**

<b>1. GRI 2.11 .....</b>	<b>107</b>
<b>2. GRI 3.0.....</b>	<b>116</b>

## **Annexe B – Simulation numérique sous Fluent**

<b>1. Gambit .....</b>	<b>130</b>
<b>2. Méthodes des volumes finis .....</b>	<b>130</b>
<b>3. Discrétisation des équations de transport.....</b>	<b>131</b>
<b>4. Schémas de Discrétisation .....</b>	<b>134</b>
<b>5. Couplage pression-vitesse.....</b>	<b>135</b>
<b>6. Résolution numérique.....</b>	<b>135</b>
<b>7. Critère de convergence .....</b>	<b>135</b>
<b>8. Stabilité numérique.....</b>	<b>136</b>

## **Références**



# **Introduction générale**

L'énergie se manifeste sous différentes formes dans notre univers. Elle peut être ressentie (chaleur) ou perçue (mouvement) ou les deux à la fois (combustion). Elle intervient dans tous les aspects de notre vie quotidienne (transport, chauffage, réfrigération, cuisine, etc.). Au même titre que l'eau elle est une ressource non seulement indispensable mais fort stratégique. Savoir la gérer et la préserver est capital à la survie d'un état ou d'une civilisation. Actuellement, la plus grande part de notre énergie provient de ressources fossiles (charbon pétrole, gaz) [1], et ce par la combustion de ces dernières dans des systèmes de conversion énergétique tels que les moteurs à combustion interne, les turbines à gaz ou dans les brûleurs de chaudières ou de fours.

Depuis la révolution industrielle, l'homme compte de plus en plus sur les machines pour effectuer son travail et par conséquent, la consommation d'énergie ne cesse de croître. Selon des statistiques publiées en 2015, par la compagnie pétrolière British Petroleum BP, la consommation énergétique mondiale a doublé depuis 1980, passant de 6631 à 12928 millions de tonnes équivalent pétrole. Ce qui a provoqué une augmentation de près de 180% d'émissions de CO<sub>2</sub> [1].

L'amenuisement des ressources énergétiques fossiles et la dégradation de l'environnement imposent deux démarches, la première consiste en la réduction des émissions de polluants produits par l'utilisation des carburants fossiles et la seconde de chercher de nouvelles ressources pour subvenir à nos besoins en énergie.

Les énergies renouvelables (énergies solaire et éolienne) semblent être des candidats prometteurs. Entre 2013 et 2014, une croissance de 38% (de 30,4 à 42,1 de million de tonnes équivalent pétrole) dans la production d'énergie par voie solaire est rapportée et une production de 46% de l'électricité dans le monde par l'utilisation de ressources renouvelables d'ici 2050 [2] est projetée.

Même si les énergies renouvelables semblent être une bonne alternative aux ressources fossiles, elles présentent, néanmoins, un certain nombre d'inconvénients. Certes, elles sont gratuites mais leur exploitation nécessite la mise en œuvre de technologies coûteuses ce qui retarde leur implantation dans un avenir proche. De plus ces ressources ne sont pas toujours disponibles là ou quand on en a le plus besoin. Ces contraintes imposent l'utilisation d'un vecteur énergétique qui peut être produit par ces ressources, stocké et transporté. L'hydrogène s'avère un excellent candidat [3].

Néanmoins, l'utilisation élargie de l'hydrogène (tel que carburant pour le transport) pose, actuellement, quelques problèmes majeurs, qui résident non seulement, dans la sécurité et la technologie liées à l'exploitation, mais surtout dans le coût engendré par le remplacement des installations de conversion énergétique classiques qui nécessite un investissement important. Aussi et afin de se préparer à une économie à 100% d'hydrogène, nous pouvons dans une phase transitoire introduire de l'hydrogène produit en utilisant des ressources renouvelables, dans les hydrocarbures tel que le méthane, c'est ce que l'on appelle enrichissement à l'hydrogène. L'utilisation d'un carburant enrichi à l'hydrogène ne nécessite pas de changer les

installations et les systèmes de combustion utilisés dans les différents domaines, de plus il permet d'introduire une part de renouvelable dans les hydrocarbures.

C'est dans cet objectif que ce travail de thèse a été initié. Le choix du méthane est dû à plusieurs raisons. En effet, en plus d'être un combustible relativement propre, il est très largement utilisé dans la production d'électricité dans le monde ainsi que pour le chauffage, les fours dans l'industrie et pour de multiples applications domestiques. Son utilisation a connu une croissance de 234%, de 1980 à 2014, soit de 1295 à 3065 millions d'équivalent de tonnes pétrole [1]. La consommation de ce gaz représente 24% de l'énergie totale produite [1].

Ce nouveau créneau de recherche (enrichissement à l'hydrogène), peut s'avérer d'une importance capitale pour notre pays, l'Algérie qui dispose d'un excellent potentiel d'énergies renouvelables (solaire et éolien) [4][5][6] et d'un gisement de gaz naturel important. La majorité de l'électricité en Algérie est produite en utilisant des turbines à gaz. Un certain nombre d'étude a déjà démontré le potentiel de l'Algérie pour la production d'hydrogène en utilisant des ressources renouvelables comme le solaire photovoltaïque et l'énergie éolienne [7,8], mais le champ d'investigation reste ouvert.

Dans cette étude notre intérêt porte essentiellement sur l'effet de l'hydrogène sur les flammes de diffusion turbulente du méthane. Ces dernières ont retenu spécialement notre attention, du fait de leurs larges utilisations dans l'industrie, dans les fours ainsi que dans les turbines à gaz. Par ailleurs ces flammes offrent l'avantage d'être plus sûres. En effet comme les réactifs arrivent dans des conduites différentes, le retour de flamme est évité. Néanmoins, le problème qui reste à contrôler réside dans le phénomène d'extinction par décrochage de la flamme. Par ailleurs le niveau élevé des émissions de gaz polluants pour les flammes de diffusion turbulente en comparaison aux flammes pré-mélangées continue à attirer les regards.

Le manuscrit est organisé en quatre chapitres, deux annexes, complétés par une introduction et une conclusion générales.

Le premier chapitre est dédié à la technique "enrichissement à l'hydrogène" des carburants et plus spécifiquement du méthane. Les propriétés physico-chimiques des deux gaz (méthane et hydrogène) sont rappelées. Un ensemble de travaux qui ont porté non seulement sur différents systèmes de conversion d'énergie tels que les moteurs à combustion interne et les brûleurs, mais également sur des dispositifs plus fondamentaux, tels que la bombe fermée est présenté. Le lecteur y trouvera également une analyse se basant sur l'indice de Wobbe afin de donner une limite de l'enrichissement à l'hydrogène du gaz naturel, sans affecter le fonctionnement des installations utilisant le gaz naturel.

Le second chapitre est consacré à la modélisation d'une flamme de diffusion turbulente avec ses différents aspects. Pour cela, un aperçu sur la stabilisation d'une flamme de diffusion turbulente, une revue des outils mathématiques nécessaires à cette modélisation, les différents modèles de turbulence disponibles dans la littérature ainsi que les approches de couplage entre la chimie et la turbulence sont présentés.

Le troisième chapitre comporte deux parties. La première concerne une étude comparative de trois modèles de turbulence en utilisant deux schémas cinétiques. Le but est de déterminer les modèles qui seront utilisés pour la suite de cette étude. Dans la seconde, il est question de l'effet de l'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène. Pour cela, le taux d'hydrogène volumique, a été varié de 0 à 50 %. Notre intérêt a porté sur l'effet de l'hydrogène sur la structure de la flamme, la température de combustion, les émissions de monoxyde et de dioxyde de carbone ainsi qu'à l'émission de monoxyde d'azote et à la vitesse d'écoulement des gaz.

Pour la dernière partie de cette étude qui constituera le quatrième chapitre, l'effet combiné du taux d'hydrogène, de la température initiale des gaz et de la pression ambiante sur une flamme de diffusion turbulente avec flamme pilote du mélange méthane hydrogène a retenu notre attention.

# **Chapitre I :**

## **Enrichissement du méthane à l'hydrogène**

Afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre et améliorer les performances des systèmes de conversion d'énergie, tel que les moteurs à combustion interne, les regards se sont orientés vers un nouveau créneau de recherche qui pourrait offrir de nombreuses opportunités.

L'idée consiste à ajouter une certaine proportion d'hydrogène aux carburants conventionnels tels que le méthane et le gaz naturel. Cette technique appelée « enrichissement à l'hydrogène des carburants » a été testée pour la première fois dans un laboratoire de la NASA à Washington en 1977, où une équipe a fait des tests sur un moteur à combustion interne et a trouvé que l'ajout d'hydrogène à l'essence permet de repousser les limites de mélange pauvre en carburant (avec un excès d'air important) ce qui a permis la réduction d'émission d'oxyde d'azote d'une part, et de monoxyde de carbone et des gaz imbrulés d'autre part [9].

Il est important de noter que l'ajout d'hydrogène permettra d'apporter au nouveau mélange (carburant / hydrogène) une partie des propriétés de l'hydrogène telle qu'augmenter la vitesse de propagation de flamme, du fait que l'hydrogène a une vitesse de propagation de flamme très élevée, ou encore de permettre d'avoir une combustion pour un coefficient de mélange qui n'aurait pas permis l'allumage d'une flamme avec le combustible pur.

Par ailleurs, l'hydrogène ne renfermant pas de carbone, sa combustion ne produit par conséquent que de l'eau et de la chaleur et de ce fait, son ajout à un carburant ne peut que réduire la quantité de monoxyde et de dioxyde de carbone résultant de la combustion du mélange pour une même puissance de flamme.

Afin de donner au lecteur une vision globale sur l'amélioration de la combustion du méthane par l'ajout d'une certaine quantité d'hydrogène, nous présentons dans ce qui suit un ensemble de travaux qui ont porté non seulement sur différents systèmes de conversion d'énergie tels que les moteurs à combustion interne et les brûleurs, mais également sur des dispositifs plus fondamentaux tels que la bombe fermée.

Mais avant cela, les principales propriétés intrinsèques des deux constituants du mélange (l'hydrogène et le méthane) sont brièvement rappelées.

### 1. Propriétés physiques du méthane et de l'hydrogène

Le tableau I.1 regroupe les principales propriétés physiques du méthane et de l'hydrogène.

	Hydrogène (H <sub>2</sub> )	Méthane (CH <sub>4</sub> )
Masse molaire (g/mol)	2.02	16.04
Température critique (K)	33.2	190.65
Pression critique (bar)	13.5	45.4
Densité à 1 bar et 293 K (kg/m <sup>3</sup> )	0.0838	0.651
Densité à 139 bar et 293 K (kg/m <sup>3</sup> )	10.58	111.2
Pouvoir calorifique inférieur par unité de masse (MJ/kg)	120	48
Pouvoir calorifique supérieur par unité de masse (MJ/kg)	142	53
Pouvoir calorifique inférieur par unité de volume aux conditions normales (MJ/m <sup>3</sup> )	11	35
Pouvoir calorifique supérieur par unité de volume aux conditions normales (MJ/m <sup>3</sup> )	13	39
Limites d'explosion dans l'air en fraction volumique (%)	18.2-58.9	5.7-14
Limites d'inflammabilité dans l'air (%)	4.2-74	5.3-15
Diffusivité moléculaire dans l'air (m <sup>2</sup> /s)	6.1 10 <sup>-5</sup>	1.6 10 <sup>-5</sup>
Température d'auto-inflammation (K)	844	813
Température de flamme adiabatique (K)	2318	2148
Energie minimale d'allumage dans l'air (mJ)	0.02	0.29

**Tableau I.1:** Propriétés physiques du méthane et de l'hydrogène [10,11].

L'examen des valeurs du tableau I.1 permet de noter que l'énergie nécessaire à l'allumage de l'hydrogène est inférieure de près de quinze fois à celle du méthane, de même que ses limites d'inflammabilité et d'explosion dans l'air sont bien plus larges que celles du méthane. Par ailleurs, la diffusivité de l'hydrogène dans l'air est cinq fois plus importante. Il en résulte que l'hydrogène est plus inflammable que le méthane et de plus l'allumage et le maintien de la flammes sont plus faciles.

Nous pouvons également remarquer que l'hydrogène est huit fois moins dense que le méthane et même si le pouvoir calorifique de l'hydrogène est plus de deux fois supérieur à

celui du méthane, la densité d'énergie potentielle chimique contenue dans l'hydrogène reste plus de trois fois inférieure à celle du méthane.

Ces atouts font de l'ajout de l'hydrogène au méthane une solution optimale. En effet, le mélange des deux gaz a pour objectif de bénéficier des points forts des deux gaz qui semblent être complémentaires. L'hydrogène ayant une plus grande facilité à s'enflammer et produisant plus de chaleur, pourrait améliorer les propriétés de combustion du méthane. En outre, ajout de l'hydrogène au méthane réduira la présence de carbone et donc la production de dioxyde de carbone après combustion.

Le tableau I.2 donne les propriétés du mélange méthane hydrogène. Nous pouvons constater que pour un mélange avec une fraction volumique d'hydrogène de 20%, la proportion massique ne représente que 3.11%. Nous remarquons également une légère réduction de la fraction massique de carbone contenue dans le mélange. Avec une fraction volumique d'hydrogène de 20% dans le mélange, le pouvoir calorifique par unité de volume du mélange est réduit de près de 14%.

	CH <sub>4</sub>	5% H <sub>2</sub>	10% H <sub>2</sub>	15% H <sub>2</sub>	20% H <sub>2</sub>
Fraction volumique de méthane (%)	100	95	90	85	80
Fraction massique d'hydrogène (%)	0	0.67	1.42	2.22	3.11
Fraction de carbone (%)	75	74.51	73.97	73.38	72.73
Pouvoir calorifique inférieur par volume (MJ/m <sup>3</sup> )	35	33.8	32.6	31.4	30.2

**Tableau I.2:** Propriétés du mélange méthane-hydrogène

## 2. Synthèse (non exhaustive) de travaux antérieurs sur le mélange (CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>)

Concernant l'enrichissement du méthane par l'hydrogène, on distingue quatre principaux groupes de travaux en fonction du dispositif de combustion ou du système de conversion d'énergie (moteurs à combustion interne, turbines à gaz). Le premier groupe concerne les tests de combustion dans les bombes qui sont des chambres de combustion fermées de différentes formes (cylindrique, sphérique) ; le second trait de l'utilisation du mélange dans les moteurs à quatre temps ; le troisième comprend les travaux relatifs à l'ajout de l'hydrogène dans les brûleurs et le quatrième est dédié aux travaux relatifs à l'utilisation du mélange dans les turbines à gaz.

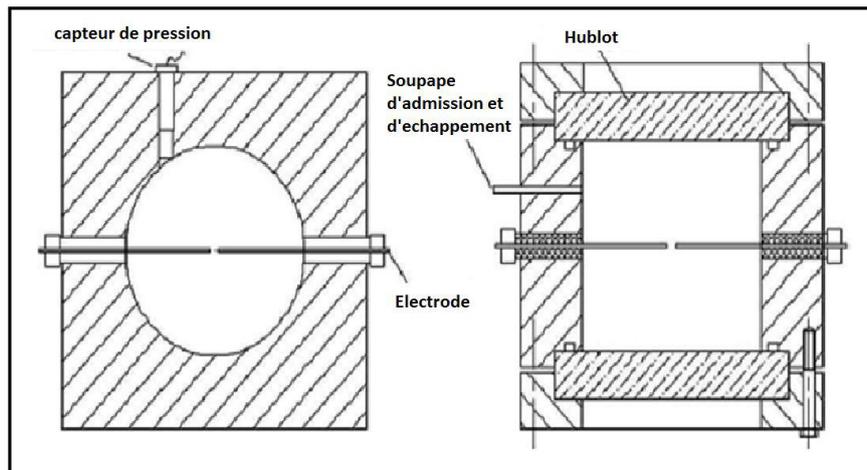
### 2.1. Tests sur des bombes

Afin de caractériser la combustion d'un carburant dans diverses conditions de pression, de température, de dilution etc. les tests dans les bombes calorimétriques sont incontournables.

Dans le contexte de l'enrichissement du méthane à l'hydrogène, les études de combustion des mélanges de méthane et d'hydrogène dans les bombes calorifiques permettent de déterminer l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la vitesse de propagation de la flamme, sur la stabilité de la flamme et sur l'apparition d'instabilités sur le front de flamme.

L'un des premiers tests de combustion du mélange (méthane - hydrogène) a été effectué par Milton et Keck en 1984 [12] dans une bombe sphérique d'un diamètre de 15.25 cm, pour une pression variant de 0.5 à 7atm et une température de 300 à 550K. Les auteurs remarquent l'augmentation de la vitesse de combustion avec l'ajout de l'hydrogène. Néanmoins, l'apparition de deux pics dans les courbes conduit ces chercheurs au constat de la nécessité d'autres investigations pour affiner leur jugement.

Avec l'amélioration des instruments de mesure et des techniques d'enregistrement, Zuohua Huang et al. [13] entreprennent en 2006, des mesures de la vitesse laminaire de combustion du mélange en visualisant la flamme à l'aide d'une caméra rapide. Les tests sont menés aux conditions normales de température et de pression, dans une bombe cubique avec des parois en verre pour permettre la visualisation en utilisant une caméra rapide (figure I.1). Le taux d'hydrogène est varié de 0 à 100% et le coefficient de richesse de 0.6 à 1.4.



**Figure I.1:** Schéma de la bombe calorimétrique (Zuohua Huang et al.[13])

Le schéma synoptique du dispositif expérimental utilisé par Zuohua Huang et al. [13] et par d'autres auteurs [14, 15, 16] pour la réalisation de leurs expériences sur la bombe calorimétrique, est illustré par la figure I.2.

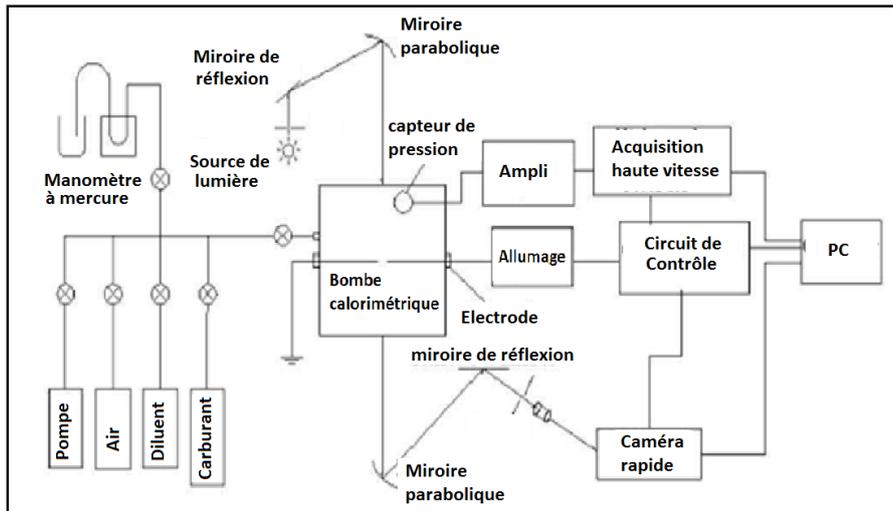
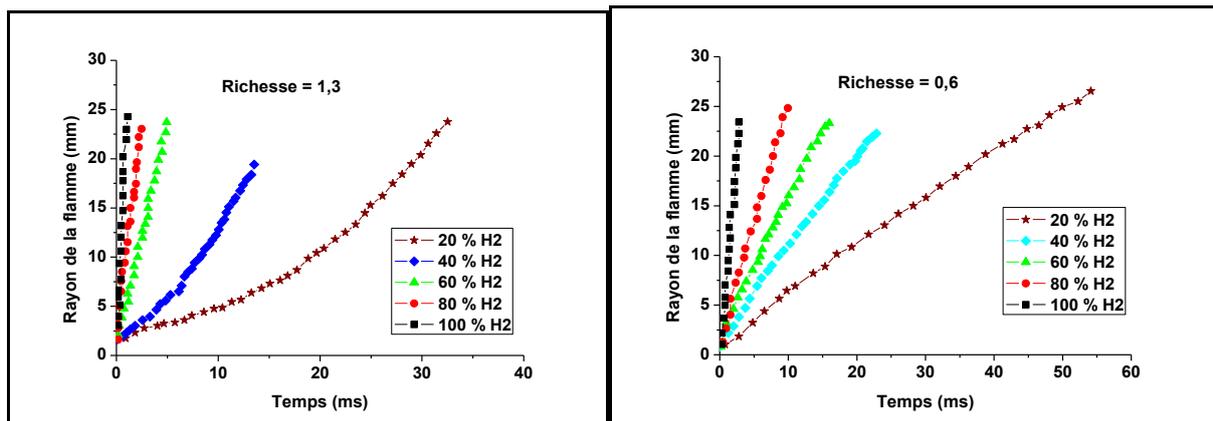


Figure I.2: Schéma du montage expérimental [13]

Les auteurs [13] rapportent l'augmentation de la vitesse de combustion avec l'ajout de l'hydrogène. En effet, l'observation des courbes de la figure I.3 représentant l'évolution temporelle du diamètre de la flamme (immédiatement après l'instant qui suit l'allumage) pour deux valeurs (1.3 et 0.6) du coefficient de richesse, permet de remarquer que la courbe relative au taux d'H<sub>2</sub> le plus élevé croît plus rapidement, ce qui se traduit par une augmentation d'autant plus importante du rayon de la flamme et donc de la vitesse de la flamme laminaire.

Selon Zuohua Huang et al. [13], l'ajout d'hydrogène provoque également l'augmentation des instabilités sur le front de flamme.



(a) : Coefficient de richesse = 1.3

(b) : Coefficient de richesse = 0.6

Figure I.3: Variation temporelle du rayon de la flamme

En utilisant le même dispositif expérimental, Haiyan Miao et al. [14] étudièrent en 2009, l'effet de la pression initiale sur le mélange, pour une pression allant de 0.08 à 0.2 MPa, une richesse de 0.8 à 1.2, et un taux d'hydrogène de 0 à 100% hydrogène. Ils remarquent d'une part une légère décroissance de l'épaisseur de la flamme avec l'augmentation de la pression et d'autre part que l'effet de la pression est atténué par l'ajout de l'hydrogène.

En 2009, Jinhua et al. [15] ont étudié l'effet de l'hydrogène sur la structure de la flamme à l'aide d'une bombe cylindrique d'un diamètre de 130 mm et une hauteur de 130 mm en utilisant le même dispositif expérimental précédent. Pour une pression de 0.1 MPa et une température de 300K, le taux d'hydrogène est varié de 0 à 40%. Les auteurs remarquent que l'ajout de l'hydrogène donnait lieu à une combustion plus homogène dans l'espace et à une augmentation de la pression maximale. Néanmoins, ils notent moins de variation de la pression maximale entre les tests.

En 2009, Haiyan Miao et al. [16] étudient avec le même dispositif l'effet de la dilution au dioxyde de carbone et à l'azote sur la combustion du mélange pour des coefficients de richesse de 0.8 à 1.2. Les expériences révèlent que l'introduction du diluant réduit la vitesse de flamme, cependant cet effet est moins important avec l'hydrogène.

### **2.2. Tests sur les moteurs à quatre temps**

L'utilisation du mélange pour les moteurs à combustion interne pourrait être une très bonne solution pour la réduction des émissions polluantes, du fait que le méthane est nettement moins polluant que les carburants classiques (essence et gasoil) d'une part, et que l'ajout de l'hydrogène pourrait améliorer les propriétés de combustion du méthane, d'autre part.

R. L. Hoekstra et al. en 1995 [17], expérimente l'ajout d'hydrogène sur un moteur Chevrolet V8 de 6 litres pour des taux de 0, 11, 20, 28 et 36% d'hydrogène. Cette étude a permis de démontrer la possibilité de fonctionnement du moteur avec des mélanges plus pauvres, avec un coefficient de richesse entre 0.83 et 0.625, ce qui permet de réduire les émissions d'oxyde d'azote à un niveau de 12 ppm.

Stuart R. Bell et Manishi Gupta en 1996 [18], font une étude sur l'extension du fonctionnement d'un moteur aux mélanges pauvres. Pour ce faire, ils utilisent un moteur quatre cylindres en ligne, de 2.5 litres et des mélanges de 0, 5, 10 et 15% d'hydrogène. L'étude révèle que dans ces limites de pauvreté, un gain de 47% dans la puissance est possible avec 15% H<sub>2</sub>. De plus la combustion est plus stable ce qui permet de repousser la limite d'un coefficient de 0.64 à moins de 0.5 avec 15% H<sub>2</sub>. D'autre part une réduction des émissions de monoxyde de carbone et d'oxyde d'azote est notée dans les limites de pauvreté.

En 1998, Sierens et Rosseel [19], entreprennent des tests sur un moteur Chevrolet de 7,4 litres, huit cylindres en V qui fonctionne à la pression atmosphérique dans le but d'améliorer le rendement avec l'ajout d'hydrogène. Ils utilisent trois compositions, 0%, 10% et 20% d'hydrogène respectivement pour 100%, 90% et 80% de méthane. Les auteurs remarquent

une augmentation maximale du rendement à 10% d'hydrogène. Par ailleurs, ils observent la réduction d'émission d'hydrocarbures imbrulés et celle des émissions de monoxyde de carbone, mais par contre, une augmentation des émissions d'oxydes d'azote (qui peuvent néanmoins être réduits avec une bonne dilution).

Per Tunestal et al. [20] en 2002, ont mené une étude expérimentale sur l'effet de l'ajout de l'hydrogène sur la combustion, dans un monocylindre de 1,6 litres à pression atmosphérique avec des taux d'hydrogène de 0,5, 10 et 15%. Il ressort de l'étude que l'ajout d'hydrogène :

- augmente le taux de combustion et stabilise la combustion aux limites de pauvreté, ce qui permet de les repousser ;
- augmente le rendement ;
- réduit les émissions de gaz imbrulés mais provoque une augmentation des émissions d'oxyde d'azote ;
- permet de retarder l'allumage des bougies ;

Après l'apparition et la généralisation de la vanne EGR (Exhaust Gas Recirculation) en 2007, l'équipe de P. Dimopoulos et al. [21] a procédé à des tests sur un moteur 4 cylindres de 1 litre, pour une puissance de 37 KW avec des mélanges d'hydrogène de 0, 10, et 15 % en faisant varier l'avance sur l'allumage et l'ouverture de la vanne EGR. L'intérêt de la vanne EGR est de diluer le mélange des gaz dans le cylindre avant la combustion et ce afin de réduire les concentrations d'azote et d'oxygène en recyclant les gaz brulés. Cependant cette diminution de la concentration d'oxygène perturbe la combustion du méthane. Les auteurs concluent qu'avec une ouverture optimale de la vanne EGR et une avance sur l'allumage optimale, l'ajout d'hydrogène permet un gain de 3% sur le rendement, une augmentation d'environ 3% sur l'efficacité de la combustion ainsi qu'un accroissement de la pression de fin de combustion d'environ 4 bars.

Dans la même année Giovanni Pede et al. [22] font une étude expérimentale, grandeur nature sur route. Pour cela ils disposent d'un véhicule de marque IVECO, équipé d'un moteur de 2.8 litres, conçu pour fonctionner au gaz naturel. En y injectant de l'hydrogène, les auteurs remarquent :

- une amélioration de l'efficacité par kilomètre roulé (une variation de 12,8 % à 10% de H<sub>2</sub> en combustion pauvre)
- une réduction des émissions de polluants par kilomètre roulé de CO, HC et NO<sub>x</sub> pour 10% H<sub>2</sub> en combustion riche.

En 2008, Dimopoulos et al. [23] publient une étude dite « du puits à la roue » sur les performances et les émissions de produits polluants. Les tests sont effectués sur un véhicule de marque Volkswagen de 1 litre avec 4 cylindres en ligne sur les quels un turbocompresseur est installé, pour des fractions volumiques d'hydrogène de 0, 5, 10 et 15%. Les auteurs rapportent que l'ajout d'hydrogène :

- augmente le rendement du moteur pour certaines conditions (position de la vanne EGR) ;
- diminue la sensibilité du moteur (réduction des performances) à la position de la vanne EGR, cela permet la réduction d'émission d'oxyde d'azote ;
- permet une réduction de l'avance sur l'allumage des bougies ;
- réduit la quantité d'hydrocarbures imbrulés (une réduction de 10%).

L. De Simio et al. [24] en 2010, ont mené une étude expérimentale sur un moteur camion de six cylindres en ligne de 200 kW avec des taux d'hydrogène allant de 0 à 50%. Les auteurs ne notent pas de grande influence quant' à l'ajout d'hydrogène sur le rendement, mais remarquent une combustion plus rapide, plus complète et plus stable, avec l'ajout de l'hydrogène notamment en mélange pauvre. En outre, ils constatent une augmentation de la pression maximale interne du cylindre avec l'ajout d'hydrogène.

En 2011, Antonino Genovese et al.[25] font des tests sur un bus sur la route, équipé d'un moteur de 6.9 litres avec 6 cylindres et une puissance de 170 kW, avec des taux volumiques d'hydrogène de 0, 5, 10, 15, 20 et 25%. Les auteurs rapportent que l'ajout d'hydrogène provoque :

- la réduction de la consommation de carburant de 5% ;
- la réduction de dioxyde de carbone de 23% pour une fraction volumique d'H<sub>2</sub> de 25% ;
- la réduction des émissions d'oxyde d'azote pour 5, 10, et 15%, de 40%, mais au-delà de ces valeurs, les émissions d'oxyde d'azote augmentent.

Salah E.L. Mohammed et al. [26] en 2011 testent un moteur monocylindre de 400 cc et un taux de compression de 14 pour des taux d'hydrogène de 0, 3, 5 et 8 %. L'hydrogène et le méthane ne sont pas préalablement mélangés mais injectés simultanément. Le moteur est testé avec un régime allant de 2000-4000 tr/min. les auteurs remarquent qu'à 2000 tr/min, le couple augmente de 3% pour 3% d'hydrogène et 1.2% pour 8% d'hydrogène. Pour un régime supérieur à 3000, le couple chute de 1%. Par ailleurs les auteurs remarquent que l'ajout d'hydrogène accroît le rendement et provoque une augmentation de la pression de fin de combustion.

Dans la même année, Cheolwoong Park et al. [27] font des tests sur un moteur de 6 cylindres de 11 litres, avec un taux de compression de 10, équipé d'un turbo. Les tests sont faits à 1260 tr/min,(régime du couple maximal). Les taux d'hydrogène varient de 0 à 40%. L'étude fait ressortir que l'ajout d'hydrogène donne une combustion plus stable aux limites pauvres, permet une réduction de 80% des émissions d'oxyde d'azote avec un mélange pauvre et de 40% de monoxyde et de dioxyde de carbone et une augmentation du rendement d'environ 4%.

### 2.3. Tests sur des turbines à gaz

La grande majorité des turbines à gaz installées dans le monde utilisent le gaz naturel comme carburant. Du fait que l'ajout d'hydrogène peut contribuer à l'amélioration de la combustion et à la réduction des émissions polluantes, il est donc important de tester ce concept sur les turbines à gaz.

En 2000, D.M. Todd et R.A. Battista [28], démontrent la possibilité de l'utilisation du mélange hydrogène méthane pour le fonctionnement d'une turbine à gaz. Les auteurs ont utilisé une turbine à gaz GE équipée d'une chambre de combustion avec injecteurs multipoints. Les tests sur du méthane pur et un mélange dilué d'hydrogène et de méthane (gaz produit par gazéification) ont montré que l'ajout d'hydrogène permet la réduction d'émission de dioxyde de carbone tout en contrôlant le niveau d'oxyde d'azote émis. Les auteurs soutiennent l'idée que l'introduction de l'hydrogène n'a pas d'incidence sur le fonctionnement des turbines ainsi que sur leur durée de vie.

Jianfan Wu et al. en 2007 [29] utilisent des turbines à gaz spécialement développées pour fonctionner avec des gaz à haute teneur en hydrogène. Les tests sont effectués sur turbines de Siemens avec des syngas produits par gazéification de la biomasse et des déchets, du méthane et un mélange avec de l'hydrogène. Les travaux menés démontrent d'une part la possibilité d'utilisation de ces différents gaz pour le fonctionnement des turbines à gaz et d'autre part que l'emploi de l'hydrogène permet la réduction d'émission de monoxyde de carbone et d'oxyde d'azote.

### 2.4. Les brûleurs

On retrouve les brûleurs dans beaucoup de systèmes de conversion d'énergie (turbines à gaz, four, chaudières etc.), ainsi que dans différents secteurs comme la production d'électricité, la métallurgie, l'agroalimentaire et l'industrie. L'utilisation du mélange méthane-hydrogène pour le fonctionnement de tels systèmes offrirait une bonne opportunité pour la réduction des émissions polluantes.

Karbasi et Wierzba en 1998 [30] ont étudié les limites de stabilité d'une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène. Ils ont utilisé un brûleur comprenant deux tubes coaxiaux, le tube central pour le jet de gaz (carburant) dans un grand tube prévu pour le jet d'air. Quatre taux d'hydrogène, (0, 15, 25 et 50%) ont été injectés avec le méthane à travers le jet central ou injecté avec le co-courant d'air à une température de 23°C et une pression de 89 kPa. L'étude fait ressortir que l'injection d'hydrogène, soit, avec le méthane ou avec le co-courant d'air, conduit à une augmentation de la stabilité de la flamme ce qui permet de tripler la vitesse du co-courant d'air avec 50% d'hydrogène. Par ailleurs avec 15% d'hydrogène on peut augmenter la vitesse du co-courant de 50% sans risque d'extinction de la flamme.

En 2001, R. W. Schefer [31] publie une étude sur la combustion prémélangée du méthane enrichi à l'hydrogène dans un brûleur avec rotationnel (prémixed swirl burner) en utilisant la fluorescence chimique d'hydroxyle. Les taux d'hydrogène varient de 0 % à 41.1%. L'auteur

démontre que l'ajout de l'hydrogène augmente la stabilité de la flamme. Il rapporte que l'ajout d'hydrogène provoque une augmentation de l'intensité des irradiations d'OH ce qui signifie un accroissement de la concentration d'OH, par conséquent la réaction est plus intense. Cet effet est néanmoins insignifiant au-delà de 13,8 % d'hydrogène.

Tomczak et al. en 2002 [32] dans une étude expérimentale et numérique sur une flamme de diffusion turbulente en utilisant une chambre de combustion d'une turbine à gaz GE, ont testé plusieurs mélanges de méthane et d'hydrogène (100, 75, 50, 25 et 0% d'hydrogène) pour un même débit massique. Les auteurs ont utilisé un détecteur par ionisation pour la mesure de gaz imbrulés, un détecteur à infrarouge pour la mesure du taux de monoxyde de carbone. Les oxydes d'azote ont été mesurés par un analyseur de luminescence chimique. L'étude expérimentale a fait ressortir que l'accroissement du taux d'hydrogène dans le mélange provoque, l'augmentation des émissions d'oxydes d'azote, une réduction significative des émissions de monoxyde d'azote et une augmentation de la stabilité de la flamme. La simulation numérique faite sur Fluent en utilisant le modèle de turbulence  $k-\mathcal{E}$  et l'approche PDF a montré un rétrécissement de la flamme et une augmentation de la température avec l'élévation du taux d'hydrogène.

Fabien Halter et al. [33] ont publié en 2007 une étude sur l'effet de l'hydrogène sur une flamme prémélangée. Les auteurs ont mené des tests avec un brûleur axisymétrique de type bec-benzène dans une chambre sous pression pour un coefficient de richesse de 0.6 et une pression de 0.5MPa. Les taux d'hydrogène utilisés sont 0, 10, et 20%. Les auteurs rapportent que l'ajout d'hydrogène raccourcit la flamme (29% plus courte pour 20% d'hydrogène), réduit son épaisseur et augmente l'intensité de la combustion. Dans la même année Cécile Cohé et al. [34], font varier avec le même dispositif expérimental, la pression dans la chambre de combustion de 0 à 0.9 MPa. Les auteurs rapportent aussi l'intensification de la réaction et le rétrécissement de la flamme avec l'introduction de l'hydrogène. Dans une étude numérique sur la même configuration en utilisant le modèle de turbulence  $k-\mathcal{E}$  et l'EDM (Eddy Dissipation Model), A.Mameri et al. [35] rapportent également les mêmes résultats.

La combustion sans flamme (MILD) connaît un très grand engouement. Ainsi, en 2008, A. Parente et al. [36] ont étudié numériquement la combustion sans flamme du mélange hydrogène méthane avec des proportions massiques d'hydrogène de 5.5, 10 et 20%. Le modèle numérique utilisé est une combinaison entre le modèle  $K-\mathcal{E}$  de turbulence et l'EDC (Eddy Dissipation concept) pour la combustion en utilisant plusieurs mécanismes réactionnels. La simulation montre une augmentation de la température de combustion avec l'ajout d'hydrogène, un accroissement de la concentration d'OH, la création d'un cœur de haute réactivité et la réduction de la concentration de dioxyde de carbone.

Amir Mardani and Sadegh Tabejamaat en 2010 [37] dans une étude numérique sur un brûleur sans flamme avec le même modèle numérique et les mêmes proportions massiques d'hydrogène, rapportent que l'ajout d'hydrogène rétrécit la flamme dans les sens axial et radial et provoque une accélération de la combustion.

En 2009, Tabet et al. [38], s'intéressent à la structure d'une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène dans une étude numérique sur le code Fluent. Le brûleur retenu est de configuration axisymétrique avec co-courant d'air et une flamme pilote. Les taux d'hydrogène varient de 0 à 50 %. Les auteurs ont employé le modèle de turbulence  $k-\mathcal{E}$  et l'approche PDF avec le modèle de flammelettes en utilisant plusieurs mécanismes réactionnels. Les auteurs rapportent une augmentation de la température, un rétrécissement de la flamme et une diminution de la concentration de dioxyde de carbone mais notent un accroissement de la concentration de monoxyde d'azote.

L'un des problèmes des plus importants et des plus récurrents avec les brûleurs prémélangés est le retour de flamme. Nicholas Syred et al. en 2012 [39] se sont penchés sur l'effet de l'hydrogène sur le phénomène de retour de flamme dans une étude expérimentale sur trois brûleurs à prémélange avec rotationnel « swirl burner » avec des coefficients de rotation différents. Ils mènent des tests sur du méthane pur et avec 15 et 30% d'hydrogène. Ils remarquent que l'ajout d'hydrogène augmente le phénomène de flash-back.

Dans une étude numérique sur un brûleur axisymétrique avec un obstacle annulaire et un co-courant d'air, Behzad Rohani, Khalid M. Saqr, en 2012 [40] s'intéressent à l'effet de l'ajout d'hydrogène sur la structure et les émissions polluantes de la flamme. Ils utilisent le modèle de turbulence  $k-\mathcal{E}$  et l'approche PDF avec le modèle de flammelettes en utilisant le mécanisme cinétique GRI 2.11 pour des taux d'hydrogène de 0 à 50%. Les auteurs rapportent que l'ajout d'hydrogène donne une flamme plus courte et moins large, augmente sensiblement la température de combustion, accélère la consommation du carburant et accroît la concentration de l'hydrogène.

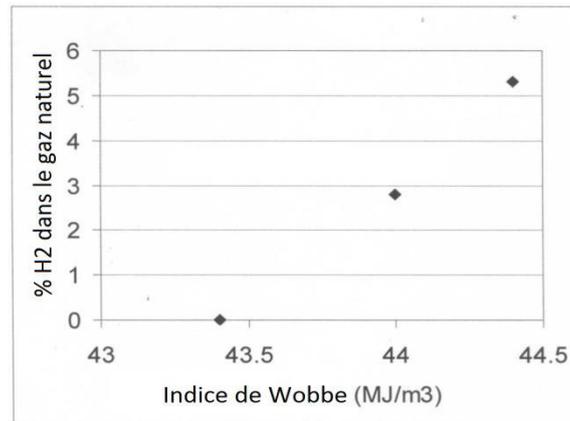
### 3. Analyse par l'indice de Wobbe

L'indice de Wobbe permet de renseigner sur l'interchangeabilité des carburants dans différents usages. Il est utilisé dans la normalisation du transport des gaz et leurs utilisations, comme pour le dimensionnement du bec de brûleur.

Pour un gaz donné, l'indice de Wobbe est défini comme le rapport entre le pouvoir calorifique supérieur et la densité du gaz en question par rapport à l'air.

L'intérêt de l'utilisation de l'indice de Wobbe pour la caractérisation du mélange méthane hydrogène est que ce dernier permet de renseigner sur la possibilité d'utilisation d'un mélange donné sans intervention sur l'installation existante comme les brûleurs.

En 2006 B.K. Slim et al. [41] publient un rapport sur la possibilité d'ajout d'hydrogène dans le réseau de distribution de gaz naturel et son impact sur les émissions de CO<sub>2</sub>. En se basant sur l'indice de Wobbe, les auteurs déterminent les limites du taux d'hydrogène admissible dans le réseau de distribution néerlandais. La figure I.4 représente le changement de l'indice de Wobbe en fonction du taux d'hydrogène. Les auteurs montrent que l'ajout d'hydrogène jusqu'à une valeur de 5% dans le méthane, n'affecte pas le fonctionnement des systèmes de combustion.



**Figure I.4:** Taux d'hydrogène en fonction de l'indice de Wobbe [41]

J. Leslie Zachariah-Wolff et al. [42] publient en 2007, une étude considérant la possibilité de l'introduction de l'hydrogène sans changement de dispositif de combustion. L'étude vise à préparer l'utilisation d'hydrogène pur. Elle se base sur la normalisation avec l'indice de Wobbe.

Dries Haeseldonckx et William D'haeseleer [43] traitent dans un rapport des moyens pour préparer une économie à 100% d'hydrogène. Ce rapport suggère, en utilisant le nombre de Wobbe, que l'introduction jusqu'à 17% d'hydrogène n'affecte en aucun cas le fonctionnement des systèmes de combustion, ni les réseaux pour le transport.

Ces études démontrent non seulement le potentiel d'utilisation de l'hydrogène mais qu'en dessous d'un certain seuil d'hydrogène dans le gaz naturel, le mélange peut être utilisé dans les infrastructures actuelles sans nécessiter une quelconque modification. Ces seuils dépendent des normes appliquées dans chaque pays ou unions économiques. Ces études préparent à l'éventualité d'utilisation de 100% d'hydrogène.

Même si l'analyse de la possibilité d'introduire de l'hydrogène dans le méthane pour la combustion par l'indice de Wobbe est intéressante, elle reste, néanmoins, insuffisante car l'indice ne prend pas en compte par exemple la vitesse de propagation de la flamme ni l'effet sur les émissions de polluants et encore moins sur la structure des flammes produites par la combustion des mélange.

Il faut noter qu'à travers la lecture des travaux cités en référence dans ce chapitre que les différents auteurs se sont intéressés à un certain nombre d'aspects de la combustion mais pas vraiment à l'effet de la pression ambiante et de la température initiale sur la structure et les émissions des flammes de diffusion turbulente. Pour les flammes avec du méthane pur nous pouvons citer Brookes et Moss [44] en 1998, qui ont réalisé une étude expérimentale portant sur l'effet de la pression ambiante sur la production de suie par une flamme de diffusion turbulente de méthane en considérant une pression entre 1 et 3 bars. Pour l'effet de la pression sur les flammes avec prémélange du mélange méthane hydrogène, quelques

chercheurs, tels que Kobayashi et al. [45] en 2005, Cohé et al. en 2007 [46] et dans la même année Griebel et al. [47] ont publié des études expérimentales sur l'effet de la pression ambiante sur différents paramètres des flammes prémélangées du mélange méthane hydrogène, mais le champ d'investigation reste largement ouvert.

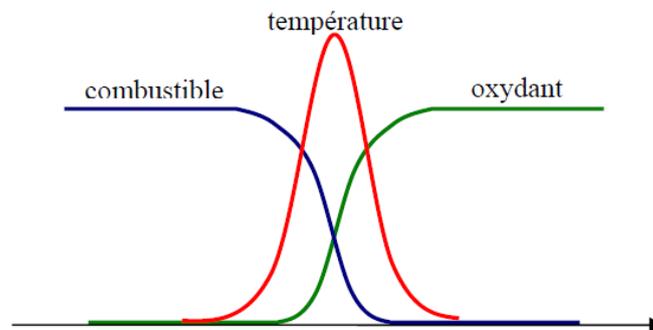
Aussi, il nous paraît, judicieux d'étudier l'effet de la pression ambiante et de la température initiale sur une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène. La présente étude vient donc comme une suite logique de ce qui a été déjà fait sur ce type de flamme.

Dans ce qui suit notre intérêt portera sur les flammes de diffusion turbulente, et les modèles mathématique pour la simulation des différents aspects de ce type de flamme.

## **Chapitre II :**

# **Théorie des flammes de diffusion turbulente**

Une flamme de diffusion turbulente se caractérise en premier lieu par le fait que les écoulements se déroulent en régime turbulent. Par opposition à une flamme prémélangée, le carburant et le comburant ne sont pas préalablement mélangés mais injectés séparément dans la chambre de combustion, d'un côté le combustible, de l'autre côté l'oxydant (le comburant) et au milieu une zone de mélange dans laquelle se produit une réaction exothermique (figure II.1), d'où une augmentation de la température.



**Figure II.1** : Structure de la zone de flamme d'une flamme de diffusion

Comparées aux flammes prémélangées, les flammes de diffusion turbulente présentent certaines caractéristiques spécifiques qui doivent être prises en compte, et peuvent conduire à des difficultés supplémentaires en modélisation. Les flammes de diffusion turbulente ne se propagent pas, elles sont situées là où le carburant et le comburant se rencontrent. Cette propriété est intéressante pour la maîtrise de la flamme, mais a des conséquences sur l'interaction turbulence/chimie. En effet sans vitesse de propagation, une flamme de diffusion turbulente est incapable d'imposer sa propre dynamique sur le champ d'écoulement, de plus elle est sensible à la turbulence. Les flammes de diffusion sont également plus sensibles à l'étirement et susceptibles d'être trempées par les fluctuations turbulentes.

D'autres points importants sont à noter, tels que la flottabilité et les effets d'entraînement. Ces effets prennent toute leur importance dans ce type de flamme, du fait que non seulement le carburant et le comburant sont injectés séparément, mais également que les réactifs peuvent avoir des propriétés et des conditions de température très différentes.

Ce premier chapitre est consacré à la modélisation d'une flamme de diffusion turbulente avec ses différents aspects. Une flamme de diffusion turbulente combine deux principaux

phénomènes, combustion et écoulement turbulent. Par conséquent si on veut modéliser une flamme de diffusion turbulente il faudra modéliser la chimie de la combustion ainsi que l'écoulement et sa turbulence. Pour ce faire, nous présenterons en premier lieu, une revue des outils mathématiques nécessaires à cette modélisation. Puis nous donnerons les différents modèles de turbulence disponibles ainsi que les approches de couplage entre la chimie et la turbulence. Mais avant cela, le lecteur trouvera un aperçu sur un aspect très important qui est la stabilisation d'une flamme de diffusion turbulente.

### 1. Stabilisation d'une flamme de diffusion turbulente

En pratique, dans les chambres de combustion et les fours, une mise à feu, (par exemple avec une étincelle) est tout d'abord effectuée. Après cette première étape, les réactifs entrants (carburant et comburant) doivent être mélangés en continu et enflammés par les gaz chauds présents dans la chambre de combustion, pour que la combustion soit continue. Le fait de maintenir cette flamme continue est appelé stabilisation, il constitue un critère de conception central pour les chambres de combustion, en particulier pour des puissances élevées. Une stabilisation insuffisante peut entraîner un dysfonctionnement qui peut être très dangereux.

Selon la manière employée pour le maintien de la flamme [48] on peut distinguer plusieurs classifications.

#### 1.1. Stabilisation par la réduction de la vitesse du jet

Une des solutions pour permettre la stabilisation de la flamme est d'installer une plaque entre le courant d'air et de carburant qui permet de freiner l'écoulement sur son rebord (figure II.2). Néanmoins, cette technique est très peu employée car la plaque doit résister à une contrainte thermique importante [48].



**Figure II.2 :** Schéma d'une flamme stabilisée par une plaque.

#### 1.2. Stabilisation avec une flamme pilote

Lorsqu'on augmente la vitesse des jets de réactifs il se produit un décollement de la flamme. Pour pallier à cet inconvénient, une flamme pilote est utilisée (figure II.3). Cette

dernière constitue une source de chaleur permanente, permettant ainsi le maintien de la flamme.

Cette technique est mise en œuvre par l'emploi d'une flamme avec prémélange, appelée également flamme secondaire, qui émane d'un conduit adjacent à celui qui amène le carburant dans la chambre de combustion.



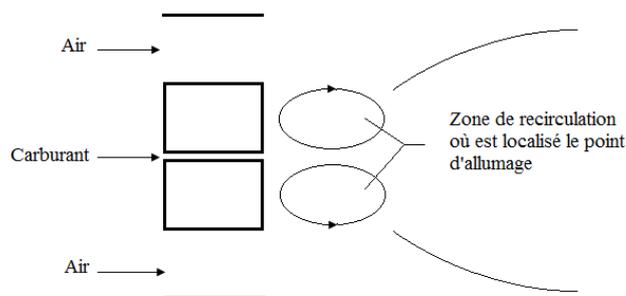
**Figure II.3 :** Schéma d'une flamme de diffusion turbulente avec flamme pilote

### 1.3. Flamme avec auto-allumage

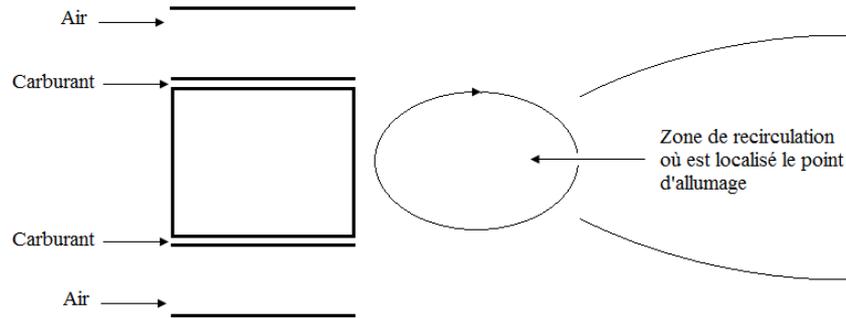
Quand l'un des gaz injectés dans la chambre de combustion est suffisamment chaud, il se produit un auto-allumage au niveau des couches de mélange. Cela permet de stabiliser la flamme, même pour de très grandes vitesses, ce qui justifie son emploi dans des systèmes où l'écoulement est supersonique.

### 1.4. Stabilisation par la création d'une zone de recirculation

Le but recherché par la création d'une zone de recirculation est de permettre toujours un bon mélange entre le carburant et le comburant. Cela peut se faire par la modification de la géométrie du brûleur de telle manière à créer cette zone à l'entrée de la chambre de combustion, qui consiste en l'introduction d'un espace vide qui permettra une expansion rapide des gaz et par conséquent une recirculation. Il existe deux manières, l'une consiste à créer un espace entre le jet d'air et de carburant (figure II.4) et l'autre serait d'imposer un espace au centre du brûleur (figure II.5).



**Figure II.4 :** Schéma d'une flamme avec zone de recirculation où les jets de carburant et comburant sont séparés



**Figure II.5 :** Schéma d'une flamme avec zone de recirculation où les jets de carburant et comburant sont du même côté

### 1.5. Stabilisation par rotationnel

Dans les installations industrielles, l'une des solutions pour favoriser le mélange est d'orienter l'écoulement d'air à l'entrée de la chambre de combustion de façon à créer une rotation de l'écoulement et de favoriser ainsi le mélange ce qui permet de stabiliser la flamme.

## 2. Choix des variables

La combustion implique de multiples espèces réactives à travers diverses réactions chimiques. La combustion se faisant à travers un écoulement, les équations de Navier-Stokes s'appliquent pour les différentes espèces qui entrent en jeu dans les réactions, ce qui nécessite donc un certain nombre de variables.

La première caractéristique des espèces chimiques impliquées dans la combustion à considérer est la fraction massique :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \tag{II.1}$$

avec  $k = 1$  à  $N$

où  $N$  est le nombre total des espèces chimiques considérées

$m_k$  est la masse de l'espèce  $k$  présente dans un certain volume  $V$  et  $m$  la masse totale de gaz présents dans ce volume.

Les variables de base nécessaires à l'étude et à la simulation d'un écoulement réactif sont [49] :

- La densité  $\rho$  ( $\rho = m/V$ ),
- Les trois composantes de la vitesse  $u_i$ ,
- Une variable pour l'énergie (la température  $T$  ou l'enthalpie),
- Les fractions massiques  $Y_k$  des  $N$  espèces.

La simulation d'un écoulement réactif exige donc de résoudre des équations pour  $N+5$  variables. Sachant que les schémas cinétiques pour la combustion du méthane peuvent impliquer parfois plus de 50 espèces, la simulation de tels systèmes exigera 50 équations de conservation (une équation pour chaque espèce) ou plus.

### 2.1. Variables Thermochimiques

Pour un mélange de  $N$  gaz parfaits, la pression totale est la somme des pressions partielles

$$p = \sum_{k=1}^N p_k \quad (\text{II.2})$$

$$p_k = \rho_k \frac{R}{W_k} T \quad (\text{II.3})$$

Où  $T$  est la température,  $\rho_k = \rho Y_k$ , la densité de l'espèce  $k$  et  $W_k$  sa masse molaire.

La masse molaire du mélange  $W$  est donnée par

$$\frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{II.4})$$

La fraction massique ( $X_k = \frac{W}{W_k} Y_k$ ) est certes utilisée par la plupart des code de calcul, mais d'autres variables sont également introduites telles que :

La concentration molaire  $[X_k]$  qui représente le nombre de moles d'une espèce  $k$  par unité de volume, et dont l'expression est :

$$[X_k] = \rho \frac{Y_k}{W_k} = \rho \frac{X_k}{W} \quad (\text{II.5})$$

L'enthalpie d'une espèce  $k$  dans un écoulement réactif est définie par la somme de l'enthalpie sensible ( $h_{s,k}$ ) qui est produite par la réaction et qui est nulle à  $T=T_0=298.15$  K et l'enthalpie de formation ( $\Delta h_{f,k}^o$ ) qui représente la quantité d'énergie nécessaire à la production de l'unité de masse d'une espèce  $k$  aux conditions standards (à  $T=298.15$  K)

$$h_k = \underbrace{\int_{T_0}^T C_{pk} dT}_{\text{Sensible}(h_{s,k})} + \underbrace{\Delta h_{f,k}^o}_{\text{Chimique}} \quad (\text{II.6})$$

$C_{pk}$  étant la chaleur spécifique à pression constante de l'espèce  $k$ .

Pour un mélange de  $N$  espèces, l'enthalpie totale du mélange est représentée par la somme des enthalpies de chaque espèce et a pour expression :

$$h = \sum_{k=1}^N h_k Y_k = \sum_{k=1}^N \left( \int_{T_0}^T C_{pk} dT + \Delta h_{f,k}^o \right) Y_k = \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o Y_k \quad (\text{II.7})$$

Où  $C_p$  la chaleur spécifique du mélange est donnée par :

$$C_p = \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k \quad (\text{II.8})$$

Un autre paramètre à considérer est l'énergie interne ( $e = h - p/\rho$ ) qui pour un écoulement réactif est donnée par :

$$\begin{aligned} e &= \sum_{k=1}^N \left( \int_{T_0}^T C_{pk} dT - RT/W_k + \Delta h_{f,k}^o \right) Y_k = \sum_{k=1}^N \left( \int_{T_0}^T C_{vk} dT - RT_0/W_k + \Delta h_{f,k}^o \right) Y_k \\ &= \int_{T_0}^T C_v dT - RT_0/W + \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^o Y_k = \sum_{k=1}^N e_k Y_k \end{aligned} \quad (\text{II.9})$$

Où  $C_{v,k}$  est la chaleur spécifique à volume constant.

$$C_{p,k} - C_{v,k} = R/W_k \quad (\text{II.10})$$

De même que pour la chaleur spécifique à pression constante, la chaleur spécifique à volume constant est donnée par la somme des chaleurs spécifiques de chaque espèce.

$$C_v = \sum_{k=1}^N C_{v,k} Y_k \quad (\text{II.11})$$

## 2.2. Tenseur de viscosité

Pour les composantes  $u_i$  ( $i$  allant de 1 à 3) de la vitesse, le tenseur de viscosité  $\tau_{ij}$  est donné par [50] :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.12})$$

$\mu$  est la viscosité dynamique et  $\delta_{ij}$  le symbole de Kronecker.

Les tenseurs de viscosité et la pression sont souvent combinés en un seul tenseur  $\sigma_{ij}$  :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = -p\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.13})$$

## 2.3. Diffusion moléculaire de chaleur et d'espèce

La combustion fait intervenir la diffusion thermique et la diffusion des espèces chimiques impliquées et dont le maintien dépend justement de cette diffusion. Le rapport entre le coefficient de diffusion thermique et d'espèces (appelé nombre de Lewis), est donné par [51] :

$$Le_k = \frac{\lambda}{\rho C_p D_k} = \frac{D_{th}}{D_k} \quad (\text{II.14})$$

$\lambda$  représente le coefficient de diffusion thermique et  $D_k$  le coefficient de diffusion d'une espèce  $k$  dans le reste du mélange gazeux.

Le nombre de Prandtl (rapport entre la viscosité et la diffusivité thermique), a pour expression :

$$\text{Pr} = \frac{\mu C_p}{\lambda} \quad (\text{II.15})$$

Le nombre de Schmidt,  $Sc_k$ , qui compare la viscosité à la diffusion moléculaire d'une espèce  $k$ , dans le mélange est :

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} = \text{Pr} Le_k \quad (\text{II.16})$$

## 2.4. Cinétique chimique

Considérant un système chimique de  $N$  espèces et comprenant  $M$  réactions chimiques, ce dernier est représenté par la relation suivante :



où  $A_k$  est le symbole de l'espèce et  $k$ ,  $\nu'_{kj}$  et  $\nu''_{kj}$  les coefficients stœchiométriques molaires de la réaction  $j$ .

Le principe de conservation de masse donne :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} W_k = \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} W_k \text{ ou } \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k = 0 \text{ pour } j = 1 \text{ à } M \quad (\text{II.18})$$

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

Le taux de réaction massique global d'une espèce  $k$ ,  $\dot{\omega}_k$ , est la somme des taux  $\dot{\omega}_{kj}$  produit par les  $M$  réactions [51]

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} Q_j \text{ avec } Q_j = \frac{\dot{\omega}_{kj}}{W_k \nu_{kj}} \quad (\text{II.19})$$

où  $Q_j$  est le taux d'avancement de la réaction  $j$ .

En faisant la somme des taux de réaction massique  $\dot{\omega}_k$  on obtient :

$$\sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \left( Q_j \sum_{k=1}^N W_k \nu_{kj} \right) = 0 \quad (\text{II.20})$$

ce qui démontre la conservation de la masse.

Le taux d'avancement d'une réaction  $j$ ,  $Q_j$ , est donné par :

$$Q_j = K_{fj} \prod_{k=1}^N [A_k]^{\nu'_{kj}} - K_{rj} \prod_{k=1}^N [A_k]^{\nu''_{kj}} \quad (\text{II.21})$$

$K_{fj}$ ,  $K_{rj}$  sont respectivement les taux direct et inverse d'une réaction.

Ces taux constituent un problème central dans la modélisation de la combustion. Ils sont toujours modélisés en utilisant la loi empirique d'Arrhenius [51]:

$$K_{fj} = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) = A_{fj} T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{T_{aj}}{T}\right) \quad (\text{II.22})$$

$$K_{rj} = \frac{K_{fj}}{\left(\frac{p_a}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT}\right)} \quad (\text{II.23})$$

où  $p_a = 1$  bar

Le symbole  $\Delta$  est relatif au changement qui se produit lors de la réaction  $j$ .

L'observation des équations (II.22), (II.22) et (II.23) permet de noter que l'obtention du taux d'avancement individuel  $Q_j$  de chaque réaction nécessite la connaissance de la constante  $A_{fj}$ , de l'exposant de la température  $\beta_j$  et de la température d'activation  $T_{aj}$  (où l'énergie d'activation  $E_j = RT_{aj}$ ). Afin de connaître ces constantes il faut identifier les espèces qui entrent en jeu à travers l'identification de ce que l'on appelle le mécanisme réactionnel qui englobe les espèces et les réactions qui doivent se produire entre ces dernières.

ELEMENTS			
H	O	N	
END			
SPECIES			
H2	O2	OH	O H H2O HO2 H2O2 N2
END			
REACTIONS			
H2+O2=OH+OH	1.700E13	0.0	47780.
H2+OH=H2O+H	1.170E09	1.30	3626.
H+O2=OH+O	5.130E16	-0.816	16507.
O+H2=OH+H	1.800E10	1.0	8826.
H+O2+M=HO2+M	2.100E18	-1.0	0.
H2/3.3/ O2/0./ N2/0./ H2O/21.0/			
H+O2+O2=HO2+O2	6.700E19	-1.42	0.
H+O2+N2=HO2+N2	6.700E19	-1.42	0.
OH+HO2=H2O+O2	5.000E13	0.0	1000.
H+HO2=OH+OH	2.500E14	0.0	1900.
O+HO2=O2+OH	4.800E13	0.0	1000.
OH+OH=O+H2O	6.000E08	1.3	0.
H2+M=H+H+M	2.230E12	0.5	92600.
H2/3./ H/2./ H2O/6.0/			
O2+M=O+O+M	1.850E11	0.5	95560.
H+OH+M=H2O+M	7.500E23	-2.6	0.
H2O/20.0/			
HO2+H=H2+O2	2.500E13	0.0	700.
HO2+HO2=H2O2+O2	2.000E12	0.0	0.
H2O2+M=OH+OH+M	1.300E17	0.0	45500.
H2O2+H=H2+HO2	1.600E12	0.0	3800.
H2O2+OH=H2O+HO2	1.000E13	0.0	1800.
END			

**Figure II.6 :** Mécanisme réactionnel proposé par Miller et al. pour la combustion de l'hydrogène [52]

La figure II.6 illustre un mécanisme réactionnel proposé pour la combustion de l'hydrogène avec de l'air et donné dans le format utilisé dans le logiciel CHEMKIN. Les constantes données sont respectivement  $A_j$ ,  $\beta_j$  et  $E_j$ .

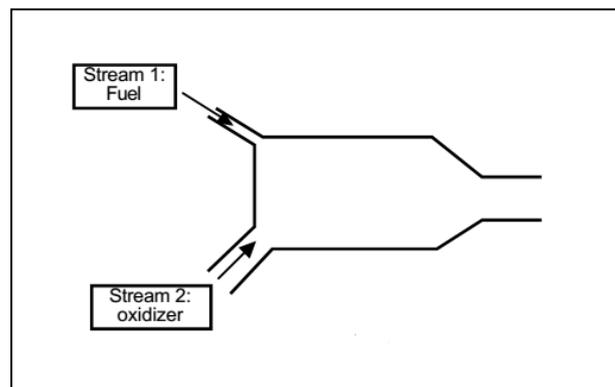
### 2.5. Stœchiométrie

Pour une flamme de diffusion turbulente, objet de notre étude, le carburant et le comburant sont introduits séparément dans la chambre de combustion à travers deux (ou plusieurs) entrées, où les taux d'écoulement et les fractions de la masse sont contrôlées séparément.

Pour un brûleur (figure II.7), avec seulement deux entrées (une pour le flux de combustible où  $Y_F^1$  représente la fraction massique de combustible et l'autre pour le flux d'oxydant où  $Y_O^2$  est la fraction massique d'oxydant) une première définition de la richesse est:

$$\phi = s(Y_F^1/Y_O^2) \quad (\text{II.24})$$

Où  $s$  est le rapport stœchiométrique de masse



**Figure II.7 :** Schéma d'un brûleur sans prémélange

Ce rapport caractérise la structure locale des flammes qui se forment lorsque les deux courants (carburant et comburant) interagissent. Cependant, il ne représente pas le comportement global du brûleur pour lequel une richesse  $\phi_g$  globale doit être définie comme suit:

$$\phi_g = s\dot{m}_F^1/\dot{m}_O^2 \quad (\text{II.25})$$

Où  $\dot{m}_F^1$  et  $\dot{m}_O^2$  sont respectivement les débits massiques du carburant à l'entrée 1 et du comburant à l'entrée 2.

Les richesses globale  $\phi_g$  et locale  $\phi$  peuvent être liées par la relation:

$$\phi_g = \phi \dot{m}^1 / \dot{m}^2 \quad (\text{II.26})$$

Où  $\dot{m}^1$  et  $\dot{m}^2$  sont respectivement les débits massiques aux entrées 1 et 2.

### 3. Equations de conservation

#### 3.1. Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de quantité de mouvement est la même pour un écoulement réactif ou non réactif [50]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} \quad (\text{II.27})$$

où  $f_{k,j}$  est la force de volume agissant sur l'espèce  $k$  dans la direction  $j$ .

Même si cette relation ne comprend pas de termes représentant la réaction de manière explicite, l'écoulement est modifié par combustion. En effet, la viscosité dynamique  $\mu$  varie fortement du fait que la température change dans un rapport de 1/8 ou de 1/10. La densité varie également dans le même rapport et la dilatation le long du front de flamme augmente les vitesses dans le même rapport. En conséquence, le nombre de Reynolds local varie beaucoup plus que dans un écoulement non réactif. Donc même si les équations cinétiques avec et sans combustion sont identiques, l'écoulement est très différent. Un exemple typique se trouve dans les jets. En effet, un jet turbulent peut devenir laminaire s'il est réactif.

#### 3.2. Conservation de la masse et des espèces

De même que pour un écoulement non réactif, l'équation de conservation de la masse est donnée par [50]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{II.28})$$

Pour une espèce  $k$  l'équation (II.28) s'écrit comme suit [50] :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k \text{ pour } k = 1 \text{ à } N \quad (\text{II.29})$$

où  $V_{k,i}$  est la composante  $i$  de la vitesse de diffusion de l'espèce  $k$  et  $\dot{\omega}_k$  son taux de réaction.

Par définition :

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_{k,i} = 0 \text{ et } \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0 \quad (\text{II.30})$$

La vitesse de diffusion est obtenue par la résolution du système d'équations suivant [53] :

$$\nabla X_p = \sum_{k=1}^N \frac{X_p X_k}{D_{pk}} (V_k - V_p) + (Y_p - X_p) \frac{\nabla P}{P} + \frac{\rho}{P} \sum_{k=1}^N Y_p Y_k (f_p - f_k) \text{ pour } p = 1 \text{ à } N \quad (\text{II.31})$$

où  $D_{pk} = D_{kp}$  est la diffusion binaire de l'espèce  $k$  dans l'espèce  $p$  et vice-versa et  $X_k$  est la fraction molaire de l'espèce  $k$   $X_p = Y_k W / W_k$ . Dans l'équation (II.31), la diffusion de masse due aux gradients de température est négligée.

### 3.3. Equation de conservation de l'énergie

Pour la simulation de la combustion, l'équation de conservation de l'énergie est déterminante. Elle peut être écrite sous plusieurs formes. Une des plus couramment utilisées est celle de l'enthalpie sensible [49]:

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_T + \dot{Q} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) \quad (\text{II.32})$$

$\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}$  représente le flux de chaleur, il est exprimé par la loi de Fourier.

Le terme  $\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}$  associe la diffusion des différentes espèces avec celles des diverses enthalpies.

$\dot{Q}$  représente la source de chaleur (due par exemple, à un laser ou un arc électrique).

$\dot{\omega}_T$  est le dégagement de chaleur imputé à la combustion ; il est donné par [51]:

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (\text{II.33})$$

Le système d'équations de Navier-stokes pour un écoulement réactif est fermé par l'équation d'état pour un gaz parfait.

$$P = \rho r T \quad (\text{II.34})$$

#### 4. La fraction de mélange $z$

La fraction de mélange  $z$  est un scalaire passif utilisé pour quantifier la proportion du mélange entre le combustible et le comburant. Sa définition dépend de la complexité du mécanisme réactionnel utilisé ainsi que de la diffusion des espèces chimiques.

La définition la plus simple est donnée pour un mécanisme à une seule étape. Par exemple une réaction du type [50] :



où  $F$ ,  $O$  et  $P$  symbolisent respectivement le combustible, l'oxydant et les produits de la combustion.

$S$  est le coefficient stœchiométrique molaire de la réaction.

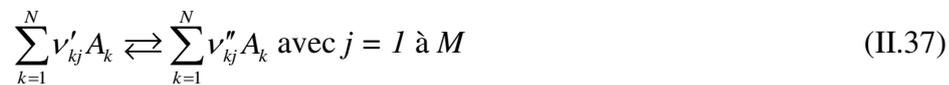
Pour une telle réaction, la fraction de mélange est donnée par [50]:

$$z = \frac{sY_F - Y_O + Y_O^o}{sY_F^f + Y_O^o} \quad (\text{II.36})$$

où  $s = S \frac{M_O}{M_F}$

Quand un schéma cinétique détaillé avec plusieurs réactions et de nombreuses espèces chimiques est utilisé, cette définition de la fraction de mélange n'est plus valable. En effet l'introduction de nouvelles espèces chimiques tels que les radicaux font que ce scalaire tel que défini dans l'équation (II.36) n'est plus un scalaire passif. Pour pallier à cette contrainte une définition basée sur les éléments constituant les espèces chimiques, comme l'oxygène l'hydrogène et le carbone est utilisée

Si l'on considère un mécanisme réactionnel comprenant  $M$  réactions impliquant  $N$  espèces chimique, la  $j^{\text{ème}}$  réaction est donnée par :



Si l'indice  $p$  fait référence à un élément chimique constituant des espèces en présence, la fraction de mélange pour cet élément est donnée par [49]:

$$z_p = \sum_{k=1}^N a_{kp} \frac{W_p}{W_k} Y_k = W_p \sum_{k=1}^N a_{kp} \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{II.38})$$

Avec un nombre de Lewis unitaire, les fractions de mélange pour chaque élément seraient équivalentes. Mais si cette condition n'est pas remplie, il faut trouver une autre définition. Une solution est proposée par Pitsch et Peters (1998) et qui consiste à définir directement  $z$  comme étant la solution de l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \rho z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i z}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho D_z \frac{\partial z}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.39})$$

## 5. Echelles caractéristiques de la turbulence et de la combustion

La modélisation de la combustion turbulente implique la simulation de la turbulence et de la combustion. Il est donc nécessaire de connaître les caractéristiques de ces dernières, ce qui nous permettra de décrire l'interaction entre ces deux phénomènes. Dans ce qui suit, une description phénoménologique de la turbulence avec une introduction de ses échelles caractéristiques et de celles de la combustion sera présentée.

### 5.1. Echelles caractéristiques de la turbulence

La turbulence est une caractéristique de l'écoulement, qui apparaît lorsque les forces d'inertie sont prépondérantes à celles de la viscosité (aux grands nombres de Reynolds). Les écoulements turbulents sont irréguliers dans le temps et dans l'espace et sont caractérisés par un aspect tourbillonnaire.

Si l'on place de la fumée dans un écoulement turbulent d'air, on remarque que celle-ci se dissipe fortement. Les grands tourbillons se divisent en petits tourbillons qui se partagent à leur tour en plus petits tourbillons. Ce procédé continue jusqu'à ce que les forces visqueuses prennent le dessus et dissipent les plus petits tourbillons. Cette cascade de tourbillons est introduite par la théorie de Kolmogorov (1941) pour la turbulence homogène et isotrope [54].

Cela implique que l'énergie contenue dans les grands tourbillons est transmise aux plus petits et ainsi de suite jusqu'à la plus petite échelle existant dans l'écoulement, (l'échelle  $\eta$ ). On parle de production d'énergie lorsque les grosses structures sont générées par un décollement par exemple et de dissipation d'énergie lorsque les tourbillons disparaissent complètement en aval de l'obstacle. Lorsque la production d'énergie est égale à la dissipation d'énergie, on parle alors de turbulence "en équilibre".

Selon la théorie de Kolmogorov [55, 56], les tourbillons dans l'écoulement turbulent ont une taille comprise entre :

- La plus grande échelle de l'écoulement  $L$  (imposée par la géométrie de l'écoulement, tels que le diamètre d'une conduite, ou la hauteur d'un obstacle), et
- La plus petite échelle de l'écoulement  $\eta$  (appelée échelle de Kolmogorov, ou échelle de dissipation visqueuse), imposée par la viscosité du fluide.

L'ordre de grandeur du rapport entre  $L$  et  $\eta$  est quasiment égal à  $Re^{3/4}$ .

L'idée fondatrice de la théorie de la turbulence de Kolmogorov [57] est que pour un nombre de Reynolds suffisamment grand, il y a une séparation d'échelle entre les structures énergétiques de l'écoulement et les structures qui dissipent cette énergie.

## 5.2. Echelles caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente

Pour une flamme de diffusion turbulente il existe deux échelles caractéristiques majeures :

- L'épaisseur de la couche de diffusion  $l_d$ , dans laquelle la fraction de mélange est comprise strictement entre 0 et 1 ( $0 < z < 1$ ), ce qui signifie que dans cette zone il y a coexistence du carburant et du comburant [49].
- L'épaisseur de la couche de réaction  $l_r$ , dans laquelle le taux de réaction est différent de zéro [49].

## 6. Simulation de la combustion turbulente avec les modèles RANS

Les équations de conservation pour les quantités moyennes, dans les simulations RANS sont obtenues en faisant la moyenne des équations de bilan instantanées. Cette procédure de calcul de la moyenne introduit des variables non fermées qui doivent être modélisées en utilisant des modèles de combustion turbulente.

### 6.1. Equations de conservation moyennées

Rappelons dans ce qui suit, les équations de conservation de la masse de la quantité de mouvement et de l'énergie :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (\text{II.40})$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) + \frac{\partial p}{\partial x_j} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} \quad (\text{II.41})$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (V_{k,i} Y_k) + \dot{\omega}_k \text{ pour } k = 1 \text{ à } N \quad (\text{II.42})$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_T + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) \quad (\text{II.43})$$

La moyenne de Reynolds consiste à diviser toute quantité  $f$  en une quantité moyenne  $\bar{f}$  et une fluctuation  $f'$  ( $f = \bar{f} + f'$ ) [50]. En utilisant cette procédure avec l'équation de conservation de masse nous obtenons :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i}) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho' u_i'}) \quad (\text{II.44})$$

où une quantité non fermée  $\overline{\rho' u'_i}$  correspondant à la corrélation entre les fluctuations de la densité et de la vitesse apparaît et nécessite une modélisation. Ce terme agit également comme un terme source de masse pour le champ d'écoulement moyen  $(\bar{\rho}, \bar{u}_i)$  qui est difficile à manipuler dans les codes CFD. En utilisant la moyenne de Reynolds, les débits moyens de masse (par exemple) peuvent ne pas être une quantité conservée dans un flux constant. La moyenne de Reynolds pour un flux à densité introduit de nombreuses autres corrélations non fermées entre une quantité  $f$  et la fluctuation de densité  $\overline{\rho' f'}$ . Pour éviter cette difficulté, il est préférable d'utiliser les moyennes de masse pondérées (appelées moyennes de Favre) [58].

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (\text{II.45})$$

Toute quantité  $f$  peut être divisée en deux composantes :

$$f = \tilde{f} + f'' \text{ avec } \overline{f''} = 0 \quad (\text{II.46})$$

En utilisant ce formalisme, les équations de conservation deviennent [49] :

- Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (\text{II.47})$$

- Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} u_i'' u_j'') \quad (\text{II.48})$$

- Conservation des espèces chimiques :

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{V}_{k,i} Y_k + \bar{\rho} u_i'' Y_k'') + \bar{\omega}_k \text{ for } k = 1, N \quad (\text{II.49})$$

- Conservation de l'enthalpie :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s) = \bar{\omega}_r + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\lambda} \frac{\partial T}{\partial x_i} - \bar{\rho} u_i'' h_s'' \right) + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k} \right) \quad (\text{II.50})$$

où :

$$\frac{Dp}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + u_i'' \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (\text{II.51})$$

Ces équations ont une forme identique à la moyenne de Reynolds pour un écoulement à densité constante. Même si la méthode de la moyenne de Favre semble simple et efficace, elle doit être néanmoins utilisée avec prudence.

Il n'y a pas de relation simple entre la moyenne de Favre  $(\tilde{f})$  et celle de Reynolds  $(\bar{f})$ . En effet, une relation entre ces deux grandeurs nécessite la connaissance, ou la modélisation, des corrélations de fluctuation de densité,  $\overline{\rho' f'}$  qui restent cachées dans les quantités de moyennes de Favre:

$$\bar{\rho} \tilde{f} = \bar{\rho} \bar{f} + \overline{\rho' f'} \quad (\text{II.52})$$

## 6.2. Fermeture des équations de conservation représentées avec la moyenne de Favre

L'objectif de la simulation de la combustion turbulente est de proposer des équations de fermeture pour les variables inconnues introduites par la moyenne de Favre.

### 6.2.1. Contraintes de Reynolds $(u_i'' u_j'')$

La fermeture de ces termes est prise en charge par le modèle de turbulence, cela peut se faire directement par une relation algébrique (par exemple le modèle de Prandtl de longueur de mélange), ou bien par des équations pour les contraintes de Reynolds (par exemple le modèle  $k-\varepsilon$  ou RSM). La majorité des modèles de turbulence sont développés pour les écoulements non réactifs et ne tiennent pas compte de manière explicite de l'effet du dégagement de la chaleur sur les contraintes de Reynolds.

### 6.2.2. Flux turbulents d'espèces $(u_i'' Y_k'')$ et d'enthalpie $(u_i'' h_s'')$

Pour fermer les équations de conservation on ajoute la supposition suivante sur les flux [49] :

$$\bar{\rho} u_i'' Y_k'' = - \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (\text{II.53})$$

où  $\mu_t$  est la viscosité turbulente calculée à partir du modèle de turbulence.  $Sc_{kt}$  est le nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce  $k$ .

## 6.3. Modèles de turbulence pour les contraintes de Reynolds

En prenant en considération l'hypothèse de Boussinesq [54], les contraintes de Reynolds sont généralement décrites en utilisant l'expression du tenseur visqueux retenu pour les fluides newtoniens.

$$\overline{\rho u_i'' u_j''} = \bar{\rho} u_i'' u_j'' = -\mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} k \quad (\text{II.54})$$

où  $\mu_t$  est la viscosité dynamique turbulente ( $\mu_t = \bar{\rho} \nu_t$ ) ;

$\nu_t$ , la viscosité cinématique ;

$\delta_{ij}$ , le symbole de Kronecker ;

$K$ , l'énergie cinétique turbulente ;

$$\text{et } k = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 u_k'' u_k'' \quad (\text{II.55})$$

La question à présent est d'évaluer la viscosité turbulente. Quatre principales approches seront discutées, à savoir, des expressions algébriques qui ne nécessitent pas d'équation, la fermeture à une équation, et les deux équations de fermeture.

### 6.3.1. Modèle à zéro équation : modèle de longueur de mélange de Prandtl

Prandtl propose une relation algébrique entre la viscosité turbulente et le gradient de vitesse [56] :

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 |\tilde{S}| \quad (\text{II.56})$$

où  $\tilde{S}$  est le tenseur de contrainte donné par :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{II.57})$$

$l_m$ , la longueur de mélange est une donnée du modèle, étroitement liée à la géométrie.

### 6.3.2. Modèle à une équation : Prandtl-Kolmogorov

Une formulation plus générale intègre une fermeture pour l'équation de conservation de l'énergie cinétique turbulente  $k$ . La viscosité turbulente est alors modélisée par [56] :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu l_{pk} \sqrt{k} \quad (\text{II.58})$$

où  $C_\mu$  est une constant du modèle.

Généralement  $C_\mu = 0.9$  et  $l_{pk}$  est une longueur caractéristique qui doit être donnée.

### 6.3.3. Modèle à deux équations : $k - \varepsilon$

C'est une approche proposée par Jones et Launder [59] où la viscosité turbulente est estimée par :

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{II.59})$$

L'énergie cinétique turbulente  $k$  et son taux de dissipation  $\varepsilon$  sont donnés par :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + P_k - \bar{\rho}\varepsilon \quad (\text{II.60})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (\text{II.61})$$

Le terme source  $P_k$  a pour expression :

$$P_k = -\bar{\rho} u_i'' u_j'' \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (\text{II.62})$$

Les contraintes de Reynolds  $\bar{\rho} u_i'' u_j''$  sont déterminées par l'expression de Boussinesq.

Les constantes du modèle dans sa version classique prennent les valeurs suivantes :

$$C_\mu = 0.09 ; \sigma_k = 1 ; \sigma_\varepsilon = 1.3 ; C_{\varepsilon 1} = 1.44 ; C_{\varepsilon 2} = 1.92$$

Le modèle  $k - \varepsilon$  est très largement utilisé pour la précision de ses résultats et du fait qu'il ne nécessite que peu de calcul.

Par ailleurs, l'utilisation de ce modèle implique implicitement un nombre de Reynolds élevé. Pour la simulation des termes sources des contraintes de Reynolds, des expressions algébriques sont utilisées notamment au voisinage des parois [54].

### 6.3.4. Modèle $k - \varepsilon$ modifié

Avec les constantes du modèle  $k - \varepsilon$  classique, plusieurs types d'écoulement (libres et confinés) peuvent être calculés. Cependant il est rapporté [40] qu'il surestime "l'épanouissement" dans les écoulements des jets axisymétriques. Plusieurs tentatives de correction ont porté sur la modification des constantes du modèle. Dally et al. proposent en 1998 la modification de la Constante  $C_{\varepsilon 1}$  et l'augmente à une valeur de 1.6 [60].

## 6.3.5. Fermetures du second ordre (RSM)

Dans ces modèles il n'est plus question de négliger les termes de contrainte de Reynolds, mais de résoudre des équations de transport de ces derniers. Les modèles de ce type sont dits "aux tensions de Reynolds ou de transport des tensions de Reynolds".

Les équations exactes de transport pour chaque composante du tenseur de Reynolds,  $\overline{\rho u'_i u'_j}$  peuvent être écrites comme suit [56] :

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\overline{\rho u'_i u'_j})}_{\text{Inertie}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_l}(\overline{\rho U_l u'_i u'_j})}_{\text{Convection (C}_{ij})} = & - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_l} \left[ \overline{\rho u'_i u'_j u'_l} + p'(\delta_{jl} u'_i + \delta_{il} u'_j) \right]}_{\text{Diffusion Turbulente (D}_{T,ij})} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_l} \left( \mu_t \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_l} \right)}_{\text{Diffusion Moléculaire (D}_{L,ij})} - \\ & \underbrace{\rho \left( \overline{u'_i u'_l} \frac{\partial U_j}{\partial x_l} + \overline{u'_j u'_l} \frac{\partial U_i}{\partial x_l} \right)}_{\text{Production (P}_{ij})} - \underbrace{2\mu \frac{\partial u'_i}{\partial x_l} \frac{\partial u'_j}{\partial x_l}}_{\text{Dissipation (\epsilon}_{ij})} + \underbrace{p \left( \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u'_j}{\partial x_i} \right)}_{\text{Corrélation de pression/déformation (\Phi}_{ij})} \end{aligned} \quad (\text{II.63})$$

L'équation de pression/déformation est donnée par la relation [56] :

$$\Phi_{ij} = \Phi_{ij,1} + \Phi_{ij,2} + \Phi_{ij,\omega} \quad (\text{II.64})$$

avec

$$\Phi_{ij,1} = -C_1 \rho \frac{\varepsilon}{k} \left( \overline{u'_i u'_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} k \right) \quad (\text{II.65})$$

$$\Phi_{ij,2} = -C_2 \left( P_{ij} + C_{ij} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (P - C) \right) \quad (\text{II.66})$$

$$\begin{aligned} \Phi_{ij,\omega} = & -C_1'' \rho \frac{\varepsilon}{k} \left( \Phi_{km,2} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{2}{3} \Phi_{ik,2} n_j n_k - \frac{2}{3} \Phi_{jk,2} n_i n_k \right) \frac{k^{3/2}}{C_1 \varepsilon d} \\ & + C_2'' \rho \frac{\varepsilon}{k} \left( \overline{u'_k u'_m} n_k n_m \delta_{ij} - \frac{2}{3} \overline{u'_i u'_k} n_j n_k - \frac{2}{3} \overline{u'_j u'_k} n_i n_k \right) \frac{k^{3/2}}{C_1 \varepsilon d} \end{aligned} \quad (\text{II.67})$$

$$C_1 = \frac{C_\mu^{3/4}}{\kappa} \quad (\text{II.68})$$

où  $n_k$  est le composant  $x_k$  de l'unité normale à la paroi et  $d$  la distance perpendiculaire à la paroi.

Le terme de dissipation est approché par le taux de dissipation isotopique  $\varepsilon$  :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{2}{3} \delta_{ij} \varepsilon \quad (\text{II.69})$$

Le terme de diffusion turbulente est modélisé de la même manière que les corrélations doubles pour les modèles de viscosité turbulente. Il est calculé en fonction du gradient des corrélations doubles :

$$D_{T,ij} = \frac{\partial}{\partial x_l} \left( \frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial \overline{u'_i u'_j}}{\partial x_l} \right) \quad (\text{II.70})$$

La viscosité turbulente  $\mu_t$  est calculée à l'aide de la relation  $\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 |\tilde{S}|$

Les constantes du modèle sont regroupées dans le tableau II.1 :

$C_1$	$C_2$	$P$	$C$	$C_1''$	$C_2''$	$C_\mu$	$\kappa$
1.8	0.6	1.68	0.7179	0.5	0.3	0.09	0.4187

**Tableau II.1** : Constantes du modèle RSM

## 7. Couplage turbulence combustion dans une flamme de diffusion turbulente

Dans les paragraphes précédents, nous avons donné une brève description de la combustion et défini les modèles de turbulence. Dans ce qui suit, il est question de faire un couplage des deux phénomènes (turbulence et combustion) à travers des algorithmes et une modélisation mathématique adéquate qui dépendent de certaines suppositions.

### 7.1. Modèles avec variables primitives et une chimie infiniment rapide

Pour une chimie infiniment rapide, la structure de la flamme est déterminée à partir de la relation d'équilibre suivante [49] :

$$\frac{Y_F^{V_F} Y_O^{V_O}}{Y_P^{V_P}} = K \quad (\text{II.71})$$

Cette structure, ne dépend que de la fraction de mélange. En fait, pour la chimie infiniment rapide, les moyennes conditionnelles ( $\overline{\rho Y_k | z^*}$ ) et ( $\overline{\rho T | z^*}$ ) se réduisent à :

$$\left( \overline{\rho Y_k | z^*} \right) = \rho(z^*) Y_k(z^*) \quad (\text{II.72})$$

$$\left( \overline{\rho T | z^*} \right) = \rho(z^*) T(z^*) \quad (\text{II.73})$$

Les fractions massiques des espèces et la température sont alors obtenues à partir des relations suivantes [49]:

$$\bar{\rho}\tilde{Y}_k = \int_0^1 \rho(z^*) Y_k(z^*) p(z^*) dz^* \quad (\text{II.74})$$

$$\bar{\rho}\tilde{T} = \int_0^1 \rho(z^*) T(z^*) p(z^*) dz^* \quad (\text{II.75})$$

ou, en termes de fonction de densité de probabilité pondérée :

$$\tilde{p}(z^*) = \rho(z^*) p(z^*) / \bar{\rho} \quad (\text{II.76})$$

$$\tilde{Y}_k = \int_0^1 Y_k(z^*) \tilde{p}(z^*) dz^* \quad (\text{II.77})$$

$$\tilde{T} = \int_0^1 T(z^*) \tilde{p}(z^*) dz^* \quad (\text{II.78})$$

Par conséquent, la détermination de  $\tilde{Y}_k$  et de  $\tilde{T}$  se résume à celle de la fonction de densité de probabilité  $\tilde{p}(z)$  de la fraction de mélange  $z$ .

Il faut noter que la détermination de la fonction de densité de probabilité (PDF) de la fraction de mélange dans les écoulements turbulents est encore un champ de recherche ouvert [61, 62]. Cette fonction de densité de probabilité peut être soit présumée, soit solution d'une équation de conservation.

Une méthode approximative mais très utilisée, consiste à présumer la forme de la PDF en utilisant des fonctions analytiques simples. La fonction  $\beta$  est la fonction la plus populaire pour les PDF présumées [63]. Elle ne dépend que de deux paramètres, la fraction moyenne de mélange  $\tilde{z}$  et sa variance  $z''^2$ .

$$\tilde{p}(z) = \frac{1}{\beta(a,b)} z^{a-1} (1-z)^{b-1} = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} z^{a-1} (1-z)^{b-1} \quad (\text{II.79})$$

où  $\beta(a,b)$  est donnée par : 
$$\beta(a,b) = \int_0^1 z^{a-1} (1-z)^{b-1} dz \quad (\text{II.80})$$

et la fonction  $\Gamma$  est décrite par : 
$$\Gamma(x) = \int_0^{+\infty} e^{-t} t^{x-1} dt \quad (\text{II.81})$$

Les paramètres  $a$  et  $b$  de la fonction de densité de probabilité sont déterminés par la fraction moyenne de mélange  $\tilde{z}$  et sa variance  $z''^2$  comme suit :

$$a = \tilde{z} \left[ \frac{\tilde{z}(1-\tilde{z})}{z''^2} - 1 \right] \quad (\text{II.82})$$

$$b = \frac{a}{\tilde{z}} - a \quad (\text{II.83})$$

Les fonctions  $\beta$  approchent assez bien la fonction de densité de probabilité réelle des fractions de mélange dans une large variété de cas. Néanmoins, en dépit de leur flexibilité, les fonctions  $\beta$  sont incapables de décrire les distributions avec une singularité pour  $z=0$  ou  $z=1$  et un maximum d'intermédiaires supplémentaires dans la plage de  $0 < z < 1$  [64].

Il faut souligner que l'utilisation d'une PDF ne dépendant que de deux paramètres (a et b) est une hypothèse très importante puisque cette PDF doit contenir la plupart des informations sur l'interaction entre la turbulence et la combustion.

Une voie alternative à la méthode de la fonction de densité de probabilité présumée est de résoudre une équation de transport de la fonction de densité de probabilité  $p(z)$  [62, 63].

## 7.2. Modèle basé sur la variance de la fraction de mélange et le taux de dissipation scalaire

Une estimation de la variance de la fraction mélange,  $z''^2$ , est encore nécessaire pour déterminer la fonction  $\beta$  de la PDF. Dans les modèles RANS,  $z''^2$  est généralement donnée en tant que solution d'une équation de conservation. L'équation de conservation pour  $z''^2$  est obtenue par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} z''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \tilde{u}_i z''^2 \right) = & \underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho u_i'' z''^2} \right)}_{\text{transport turbulent}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D \frac{\partial z''^2}{\partial x_i}} \right) + 2z'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i}} \right)}_{\text{diffusion moléculaire}} \\ & \underbrace{-2\overline{\rho u_i'' z''} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i}}_{\text{production}} - \underbrace{2\rho D \frac{\partial z''}{\partial x_i} \frac{\partial z''}{\partial x_i}}_{\text{taux de dissipation scalaire}} \end{aligned} \quad (\text{II.84})$$

Dans ce qui suit nous allons revoir les termes de cette équation.

- Le premier terme de cette équation correspond au transport turbulent. Il est modélisé en utilisant une hypothèse de gradient classique [49], qui est:

$$\overline{\rho u_i'' z''^2} = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct1}} \frac{\partial z''^2}{\partial x_i} \quad (\text{II.85})$$

où  $\nu_t$  est la viscosité turbulente et  $S_{ct1}$ , un nombre de Schmidt turbulent.

- Le terme de production est également modélisé en utilisant une hypothèse de transport de gradient [49]:

$$\overline{\rho u_i'' z''} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct2}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} \quad (\text{II.86})$$

où  $S_{ct2}$  est un nombre de Schmidt turbulent.

- Le taux de dissipation scalaire  $\tilde{\chi}_p$  mesure la décroissance des fluctuations de la fraction de mélange estimé par la variance  $z''^2$  [49]. En effet, ce taux de dissipation scalaire  $\tilde{\chi}_p$  joue, pour la fraction de mélange  $z$ , le même rôle que le taux de dissipation de l'énergie cinétique,  $\varepsilon$ , avec le champ de vitesse.

Cette analogie est souvent utilisée pour modéliser  $\tilde{\chi}_p$  avec le temps de mélange turbulent  $\tau_t = k/\varepsilon$

$$\tilde{\chi}_p = c \frac{z''^2}{\tau_t} = c \frac{\varepsilon}{k} z''^2 \quad (\text{II.87})$$

$c$ , est une constante du modèle.

Cette relation exprime simplement que les temps de dissipation scalaire et de dissipation des turbulences sont proportionnels:

$$\frac{z''^2}{\tilde{\chi}_p} = \frac{1}{c} \frac{k}{\varepsilon} \quad (\text{II.88})$$

La diffusion moléculaire est généralement négligée devant la diffusion turbulente. Ainsi l'équation de conservation de  $z''^2$  devient [49]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} z''^2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \tilde{u}_i z''^2 \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct1}} \frac{\partial z''^2}{\partial x_i} \right) + 2\bar{\rho} \frac{\nu_t}{S_{ct2}} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial x_i} - c\bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} z''^2 \quad (\text{II.89})$$

### 7.3. Modèles avec taux moyen de réaction et une chimie infiniment rapide

L'analyse précédente n'a pas besoin de fermeture pour le taux de réaction. En fait, le taux moyen de réaction  $\bar{\omega}_k$  n'est pas calculé puisque les variables primitives (température et fractions de masse des espèces) sont toutes liées directement à la fraction de mélange. Cependant, cette approche n'est pas toujours possible. En effet, lorsque les ondes de pression se propagent dans le domaine (code compressible) ou lorsque d'autres termes sources ou puits

doivent être pris en compte (par exemple, les pertes de chaleur), il devient plus pratique de travailler explicitement avec les taux de réaction [49].

Principalement deux approches ont été proposées pour modéliser les taux de réaction dans une flamme turbulente non prémélangée avec une chimie infiniment rapide. La première est une extension du concept Eddy-Break-Up, la seconde, analyse la structure de la flamme dans l'espace de la fraction de mélange [50].

### 7.3.1. Le modèle *Eddy Break-up* et le modèle d'*Eddy Dissipation*

Les modèles Eddy Break-Up et Eddy Dissipation ont été développés sous l'hypothèse d'une chimie infiniment rapide. Il en résulte que le processus de combustion peut être exprimé par une réaction irréversible en une seule étape. Par exemple la combustion du méthane est exprimée par la réaction suivante :



Spalding [65] a été le premier à proposer une fermeture pour le terme source,  $\overline{\dot{\omega}_p}$ . Selon l'auteur, la cascade d'énergie, décrivant le transfert d'énergie des grandes aux petites échelles, contrôle également la réaction chimique. Le modèle, formulé principalement pour la combustion avec prémélange, est connu sous le nom d'Eddy Break-up (UER) et il est basé sur l'expression suivante pour le taux moyen de produits de réaction:

$$\overline{\dot{\omega}_p} = \bar{\rho} C_{EBU} \frac{\varepsilon}{k} \overline{(Y_p'')^2} \quad (II.91)$$

où  $C_{EBU}$  : constante du modèle et  $Y_p''$  : variance de la fraction massique des produits

L'Eddy dissipation model (EDM), dérive directement du modèle Eddy break-up [66]. EDM est simplement obtenu à partir de l'UER en remplaçant  $Y$  par la fraction moyenne de masse des espèces déficientes, le carburant pour un mélange pauvre et de l'oxygène pour les mélanges riches. Le modèle prend le taux minimal des trois, défini par la fraction moyenne de la masse du carburant, du comburant ou du produit et a respectivement pour expression :

$$\overline{\dot{\omega}_F} = -\bar{\rho} A \bar{Y}_F \frac{\varepsilon}{k} \quad (II.92)$$

$$\overline{\dot{\omega}_O} = -\bar{\rho} A \frac{\bar{Y}_O}{\nu} \frac{\varepsilon}{k} \quad (II.93)$$

$$\overline{\dot{\omega}_p} = -\bar{\rho} A B \frac{\bar{Y}_p}{1+\nu} \frac{\varepsilon}{k} \quad (II.94)$$

où  $A$  et  $B$  sont les constantes du modèle et  $\nu$ , le coefficient de stœchiométrie.

### 7.3.2. Eddy Dissipation Concept (EDC)

L'Eddy Dissipation Concept (concept de dissipation de structures tourbillonnaires), conçu par Magnussen et Hjertager [67], s'étend directement du modèle Eddy-Break-Up pour la modélisation de la combustion non-prémélangée. La vitesse moyenne de combustion du carburant,  $\bar{\omega}_F$ , est estimée à partir du combustible  $\tilde{Y}_F$ , du comburant  $\tilde{Y}_O$  et de la fraction massique moyenne des produits  $\tilde{Y}_P$  et dépend d'un temps de mélange turbulent, estimé à partir de l'échelle intégrale de la longueur de mélange turbulente comme  $\tau_t \approx k/\varepsilon$  :

$$\overline{\rho\dot{\omega}_F} = C_{mag} \bar{\rho} \frac{1}{\tau_t} \min\left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{s}, \beta \frac{\tilde{Y}_P}{(1+s)}\right) \approx C_{mag} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \min\left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{s}, \beta \frac{\tilde{Y}_P}{(1+s)}\right) \quad (\text{II.95})$$

où  $C_{mag}$  et  $\beta$  sont deux constantes du modèle.

Dans de nombreux cas, le modèle EDC donne de bons résultats. Néanmoins, les constantes du modèle  $C_{mag}$  et  $\beta$  ainsi que le temps caractéristique de la turbulence  $\tau_t$  doivent être ajustés au cas par cas. D'autre part, le modèle EDC ne peut pas décrire précisément le mécanisme d'allumage ou de stabilisation puisque le carburant et le comburant brûlent dès qu'ils se rencontrent.

### 7.3.3. Analyse de la structure de la flamme

Les taux de réaction moyens peuvent également être estimés en supposant une structure de flamme stable [49]:

$$\dot{\omega}_k = -\frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} \quad (\text{II.96})$$

La moyenne de l'équation donne :

$$\bar{\omega}_k = -\frac{1}{2} \int_0^1 \left[ \int_0^\infty \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial z^2} p(\chi, z) d\chi \right] dz \quad (\text{II.97})$$

où  $p(\chi, z)$  est la PDF commune de la fraction de mélange et du taux de dissipation scalaire. Elle représente la probabilité que  $\chi$  et  $z$  ont des valeurs données, au même endroit et en même temps.

Pour la chimie infiniment rapide, les taux de réaction et  $\partial^2 Y_k / \partial z^2$  sont des fonctions de Dirac-delta centrées sur la valeur stœchiométrique  $z = z_{st}$  de la fraction de mélange  $z$ .

$$\frac{\partial Y_F}{\partial z} = \frac{Y_F^0}{1 - z_{st}} H(z - z_{st}) \quad (\text{II.98})$$

et 
$$\frac{\partial^2 Y_F}{\partial z^2} = \frac{Y_F^0}{1 - z_{st}} \delta(z - z_{st}) \quad (\text{II.99})$$

où  $H$  et  $\delta$  sont respectivement les fonctions échelon et de Dirac. Dans ce cas, l'équation (II.97) devient :

$$\bar{\omega}_F = -\frac{Y_F^0}{2(1 - z_{st})} \int_0^\infty \rho \chi p(\chi, z_{st}) d\chi = -\frac{Y_F^0}{2(1 - z_{st})} \left( \overline{\rho \chi | z_{st}} \right) p(z_{st}) \quad (\text{II.100})$$

où  $\left( \overline{\rho \chi | z_{st}} \right) = \bar{\rho} \tilde{\chi}_{st}$  est la moyenne conditionnelle de  $\rho \chi$  pour  $z = z_{st}$  et  $p(z_{st})$  la probabilité d'avoir  $z = z_{st}$ .

Un sous-modèle devrait être fourni pour  $\left( \overline{\rho \chi | z_{st}} \right)$ .

Le plus simple est de prendre  $\left( \overline{\rho \chi | z_{st}} \right) = \bar{\rho} \tilde{\chi}_{st}$  [49].

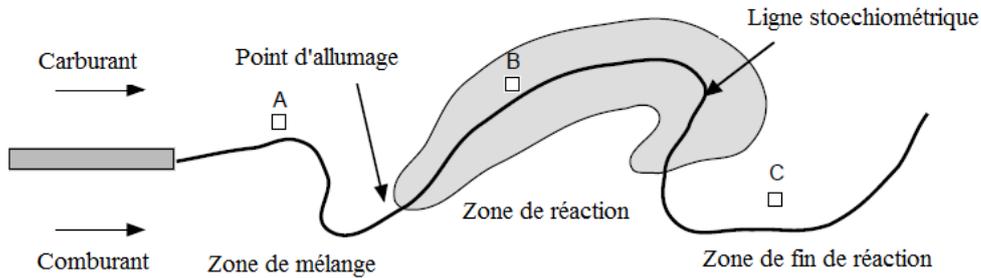
Une formulation plus précise est décrite dans la section suivante.

#### 7.4. Modèles avec variables primitives et une chimie à vitesse finie

Supposer que la chimie est infiniment rapide rend les modèles insuffisants dans de nombreux cas et par conséquent, l'intégration d'une chimie à vitesse finie dans les modèles de combustion turbulente devient nécessaire. A ce moment, le temps caractéristique de la chimie devient considérable et le lien entre les variables d'écoulement et la fraction de mélange n'est plus unique et dépend du nombre de Damköhler [49].

$$D_a^f = \frac{\tau_f}{\tau_c} \quad (\text{II.101})$$

$\tau_f$  et  $\tau_c$  étant respectivement le temps caractéristique de l'écoulement et le temps caractéristique chimique.

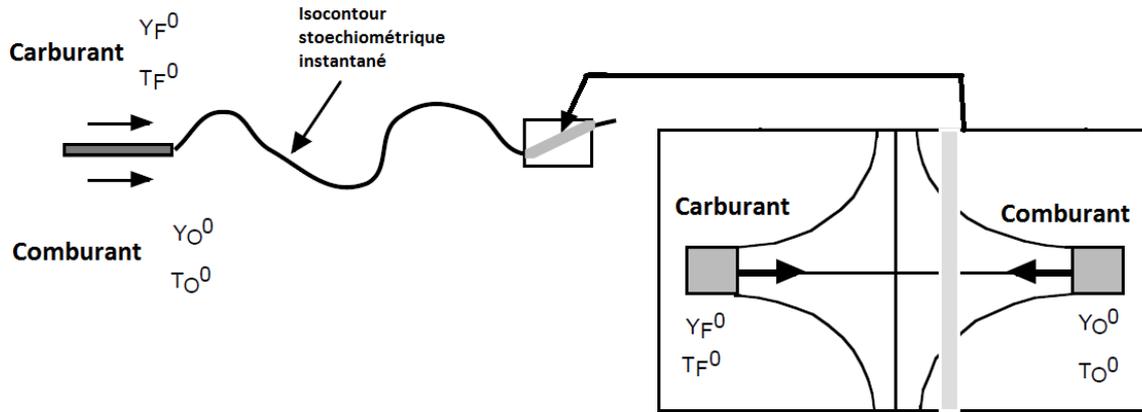


**Figure II.8 :** Structure d'une flamme de diffusion turbulente avec vitesse de réaction chimique finie.

En considérant une chimie à vitesse finie, la connaissance de la fraction de mélange  $z$  à un moment donné ne suffit plus pour déduire les fractions de masse locales des espèces ou bien de la température. Si la chimie n'est pas infiniment rapide, la valeur de  $z$  au point A pourrait correspondre à celle en un point quelconque du mélange (figure II.8) ou à un point de la zone de réaction (point B) ou à une flamme éteinte (point C). Les points A, B et C peuvent ainsi avoir la même fraction de mélange  $z$ , mais par contre des fractions de masse ou des températures très différentes. Des informations supplémentaires sont alors nécessaires pour mener correctement une modélisation de la flamme. Ceci peut être fait en utilisant le modèle de flammelettes.

### 7.5. Modélisation basée sur le concept de flammelettes

L'idée de base du concept de flammelettes est de supposer qu'une flamme de diffusion turbulente est un ensemble de flammes laminaires, (flammelettes laminaires). Cette hypothèse exige que toutes les zones de réaction soient minces par rapport aux échelles de turbulence, c'est à dire un grand nombre de Damköhler [68]. La figure II.9 schématise ce concept dans la pratique.



**Figure II.9 :** Concept de flammelettes pour une flamme turbulente non-prémélangée.

Le taux de dissipation scalaire à l'emplacement de la flamme,  $\chi_{st}$ , est le seul paramètre retenu ici. Cependant, d'autres paramètres de contrôle peuvent être ajoutés.

La structure de la flamme est donnée par un ensemble de fonctions  $T(z, \chi_{st})$ ,  $Y_k(z, \chi_{st})$ . Toutes les fonctions  $T(z, \chi_{st})$ ,  $Y_k(z, \chi_{st})$ , peuvent être calculées pour une flammelette laminaire indépendamment du code de turbulence, et stockées dans la «bibliothèque de flammelettes».

Les fractions massiques moyennes des espèces sont alors obtenues à partir des équations suivantes [49]:

$$\bar{\rho} \tilde{Y}_k = \int_0^{+\infty} \int_0^1 \rho Y_k(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st} \quad (\text{II.102})$$

Et la température moyenne par [49]:

$$\bar{\rho} \tilde{T} = \int_0^{+\infty} \int_0^1 \rho T(z, \chi_{st}) p(z, \chi_{st}) dz d\chi_{st} \quad (\text{II.103})$$

En supposant que  $z$  et  $\chi_{st}$  sont statistiquement indépendantes, nous avons :

$$p(z, \chi_{st}) = p(z) p(\chi_{st}) \quad (\text{II.104})$$

Si on les suppose en termes de fonction de densité de probabilité pondérée, il convient alors d'écrire :

$$\rho p(z, \chi_{st}) = \bar{\rho} \tilde{p}(z) p(\chi_{st}) \quad (\text{II.105})$$

Les fonctions de densité de probabilité pour la fraction de mélange  $z$  et son taux de dissipation scalaire  $\chi_{st}$  peuvent être présumés.

La PDF de la fraction de mélange  $\tilde{p}(z)$  est généralement présumée en utilisant des fonctions  $\beta$  basées sur  $z$  et  $z^{n_2}$  comme pour le cas de la chimie infiniment rapide.

Une distribution présumée est également nécessaire pour  $\chi_{st}$ .

Pitsch et Peters [69] proposent l'utilisation d'une fonction de Dirac-delta en supposant que la dissipation scalaire reste inchangée le long du front de flamme :

$$p(\chi_{st}) = \delta(\chi_{st} - \tilde{\chi}_{st}) \quad (\text{II.106})$$

Cependant, une distribution logarithmique [70] qui permet d'approcher davantage la réalité peut être utilisée :

$$p(\chi_{st}) = \frac{1}{\chi_{st} \sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln \chi_{st} - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (\text{II.107})$$

où le paramètre  $\mu$  et la moyenne de  $\chi_{st}$  sont liés selon :

$$\tilde{\chi}_{st} = \int_0^{+\infty} \chi_{st} p(\chi_{st}) d\chi_{st} = \exp\left(\mu + \frac{\sigma^2}{2}\right) \quad (\text{II.108})$$

$\sigma$  est la variance de  $\ln \chi_{st}$ . Il en résulte la relation suivante :

$$\chi_{st}^{n_2} = \tilde{\chi}_{st}^2 (\exp(\sigma^2) - 1) \quad (\text{II.109})$$

$\sigma$  peut être considérée constante.

Effelsberg et Peters [70] proposent  $\sigma = 1$ , ce qui donne :

$$\sqrt{\frac{\chi_{st}^{n_2}}{\tilde{\chi}_{st}^2}} = 1.31 \quad (\text{II.110})$$

Dans une approche différente, Liew et al. [71] proposent de lier  $\sigma$  au nombre de Reynolds, d'où l'expression :

$$\sigma = 0.5 \ln(0.1 \text{Re}_t^{0.5}) \quad (\text{II.111})$$

Dans cette formulation, il reste la définition de  $\tilde{\chi}_{st}$ , ce dernier est déduit des équations des flammelettes laminares qui lient  $\chi$  à  $\tilde{\chi}_{st}$  selon :

$$\tilde{\chi} = \tilde{\chi}_{st} \int_0^1 \frac{F(z)}{F(z_{st})} \tilde{p}(z) dz \quad (\text{II.112})$$

$$\text{où } F(z) = \exp\left(-2\left[\text{erf}^{-1}(2z-1)\right]^2\right) \quad (\text{II.113})$$

Le scalaire de dissipation moyen est modélisé par le temps caractéristique de la turbulence comme suit :

$$\tilde{\chi} = c \frac{\mathcal{E}}{k} z''^2 \quad (\text{II.114})$$

L'organisation du modèle de flammelettes basée sur des variables primitives est illustrée par la figure II.10. Le code RANS résout les équations pour les variables principales du flux ainsi que pour  $\tilde{z}$  et  $z''^2$ .

La fraction de mélange et la PDF du taux de dissipation scalaires sont alors construits et ajoutés à la structure de la flamme locale (bibliothèques de flammelettes) pour déterminer les variables du flux (température et fractions massiques des espèces en jeu). La densité est alors déduite de la température et renvoyée au code RANS.

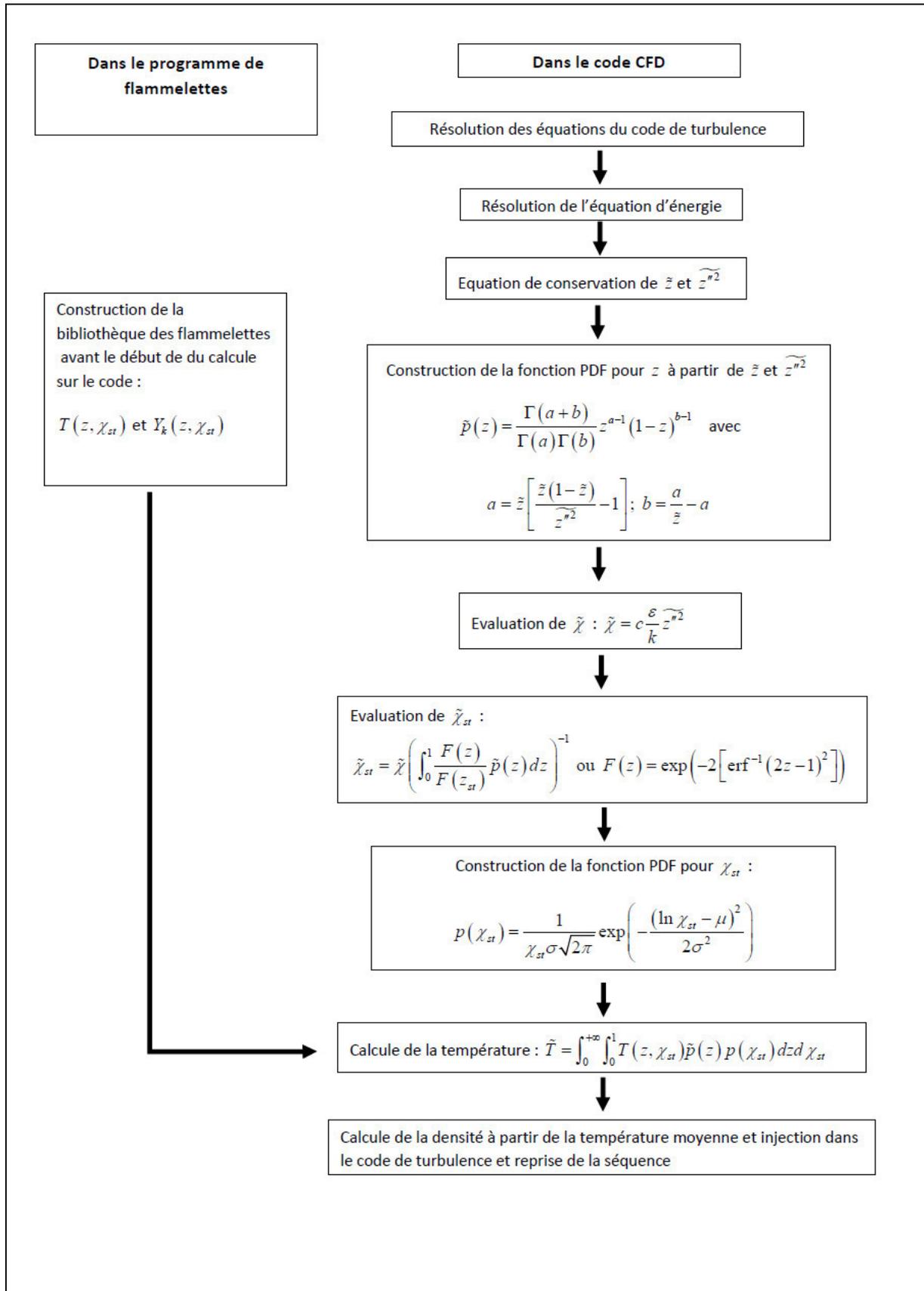


Figure II.10: Organisation du modèle de flammelettes [49]

A travers la simulation de la fraction de mélange  $z$ , tous les types de mélange peuvent être calculés. Ainsi, une flamme de diffusion turbulente peut être perçue comme un problème à deux flux avec les fractions massiques  $Y_{i1}$  et  $Y_{i2}$ . Dans ce cas la fraction de mélange  $z$  ne dépend pas du choix des éléments mais dépend linéairement de la fraction massique  $Y_k$ . Elle a les conditions aux limites  $z = 1$  et  $z = 0$  respectivement dans les premiers et second flux.

$$\frac{\partial(\rho z)}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v} z) - \text{div}(\rho D \cdot \text{grad} z) - \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{II.115})$$

Si l'on suppose que l'énergie diffuse de la même manière dans toutes les espèces, le nombre de Lewis est égal à l'unité et par conséquent les champs de température et d'enthalpie peuvent être décrits de la même manière par la fraction de mélange  $z$  [49].

Considérons les suppositions suivantes :

1. Une chimie infiniment rapide,
2. La même diffusivité  $Le = 1$ ,
3. Pas de perte d'énergie et que l'enthalpie et la température sont fonction de  $z$ ,

Dans ce cas le problème de la simulation de la combustion se réduit à celle du mélange turbulent de  $z$ . Pour cela un modèle de turbulence et une fonction de densité de probabilité (PDF) seront utilisés.

## 8. Choix des modèles

Pour entreprendre la simulation d'une flamme de diffusion turbulente, le recours à des modèles en considérant une chimie infiniment rapide pour le coût réduit induit par ce dernier est courant. Même si ces modèles peuvent prédire avec une certaine exactitude les distributions de température et des fractions massiques des espèces majeures comme le méthane et le dioxyde de carbone, ils échouent dans la prédiction des espèces mineures telles que l'hydroxyde. Ilbas et al. en 2005 [72] ont alors utilisé le modèle Eddy break-up avec un schéma réduit et constatent de même que précédemment, une bonne prédiction de la température et des espèces majeures seulement.

Un autre modèle a été utilisé par Mardani et Tabejamaat en 2010 [37] et par Frassoldati et al [73] dans la même année, pour une configuration similaire, qui donne de meilleurs résultats quand il est utilisé avec un schéma cinétique détaillé est l'EDC. Les résultats obtenus par les auteurs sont en accord avec ceux issus de l'expérience. Néanmoins le temps de calcul nécessité par l'utilisation d'un schéma cinétique détaillé reste trop important.

Une alternative aux deux approches, a consisté en l'utilisation du modèle de flammelettes. En effet, plusieurs auteurs rapportent que ce modèle peut prédire avec une précision

appréciable les caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène [74,75,76,77,78].

En 2003, Hossain et Malalasekera [79] ont comparé les résultats obtenus par simulation d'une flamme de diffusion turbulente en utilisant le modèle de flammelettes à des résultats expérimentaux obtenus par spectroscopie de Raman. Ils trouvent que bien que le modèle donne de bons résultats il est meilleur avec un nombre de Lewis égal à l'unité. En 2005 Hossain et al. [80] publient une étude sur les émissions d'oxydes d'azote des flammes de diffusion turbulente de différents mélanges de méthane et d'hydrogène. Dans la même année Yilmaz et Onbasioglu [81] s'intéressent à la production d'oxyde d'azote par une flamme de diffusion turbulente de méthane et d'hydrogène dilué avec de l'azote. Dans les deux cas, les auteurs rapportent que le modèle de flammelettes donne des résultats proches des valeurs mesurées.

En 2007, Hossain et Malalasekera [82] comparent le modèle de flammelettes à deux autres modèles de combustion à chimie infiniment rapide. Les auteurs constatent que le modèle de flammelettes donne de meilleurs résultats. Par la suite, Ravikanti et al. en 2009 [83], démontre l'efficacité du modèle de flammelettes dans la prédiction d'une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène en utilisant deux schémas cinétiques détaillés, le modèle reproduit dans les deux cas avec exactitude la répartition des fractions massiques des espèces mineures comme l'hydroxyde.

Tous ces travaux confirment la viabilité du modèle de flammelettes pour l'étude d'une flamme de diffusion turbulente dans une configuration axisymétrique. Il reste à présent la détermination du modèle de turbulence et le schéma cinétique.

Concernant le modèle de turbulence Yilmaz et Onbasioglu en 2005 [81] ont fait une étude comparative entre le modèle RSM, le modèle  $k-\varepsilon$  standard et le modèle LES. Ils trouvent que le modèle LES se rapproche mieux des résultats expérimentaux. En 2010 Frassoldati et al. [73] en comparant les modèles RSM et  $k-\varepsilon$  modifié proposé par Dally et al. en 1998 [84], démontrent que ce dernier est meilleur. En 2012 Rohani et Saqr [40] utilisent le modèle  $k-\varepsilon$  modifié pour la simulation d'une flamme avec une configuration axisymétrique.

Par ailleurs, en 2009 Ravikanti et al. [83], en utilisant le modèle de flammelettes, ont comparé trois schémas cinétiques réduits, (un schéma réduit et deux schémas détaillés le GRI 2.11 et le GRI 3). Ils concluent que les deux schémas détaillés donnent de meilleurs résultats. Une autre étude [37], compare les performances du schéma cinétique détaillé GRI 2.11 avec un schéma réduit pour une configuration semblable à celle de notre étude et confirme le bon comportement du GRI 2.11. De plus, les deux schémas, le GRI 2.11 et le GRI 3, prennent en charge la production d'oxyde d'azote.

Il faut noter que dans les études précédentes, les auteurs ne comparent pas les performances combinées des schémas cinétiques et des modèles de turbulences avec les modèles de flammelettes pour la simulation d'une flamme de diffusion turbulente de méthane.

Afin de déterminer le modèle de turbulence et le schéma cinétique pour la simulation de notre flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène, nous allons procéder dans la première partie du chapitre suivant à une étude comparative de plusieurs modèles de turbulence et de schémas cinétiques.

# **Chapitre III :**

## **Effet de l'hydrogène**

Dans ce chapitre, l'effet de l'hydrogène, (seul), sur une flamme de diffusion turbulente est étudié. La fraction volumique de l'hydrogène dans un mélange méthane-hydrogène est variée de 0 à 50 %. Une géométrie décrite par Bergmann et al. [85] et qui, par ailleurs, a fait l'objet d'une étude numérique par Tabet et al. en 2007 [86] est utilisée.

Avant d'entamer cette étude les performances de deux modèles de turbulence combinés à deux schémas cinétiques détaillés différents sont comparées.

### 1. Etude comparative de modèles de turbulence et de deux schémas cinétiques

Etant donné que la simulation d'une flamme de diffusion turbulente fait appel à un modèle de combustion et que ce dernier utilise un schéma cinétique donné, il nous a semblé pertinent de comparer divers modèles de turbulence, couplés avec des schémas cinétiques différents.

Les modèles sont consignés dans le tableau III.1

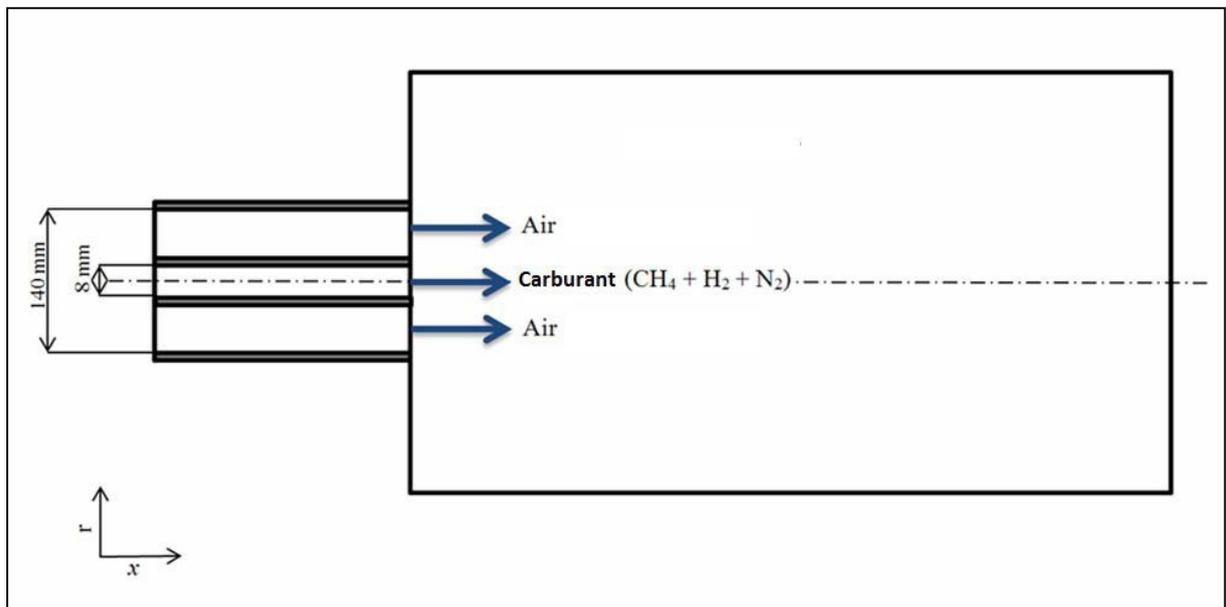
	Modèles de combustion	Modèles de turbulence	Schémas cinétiques
Modèle 1	Modèle de flammelette	RSM	GRI 3
Modèle 2	Modèle de flammelette	RSM	GRI 2.11
Modèle 3	Modèle de flammelette	k- $\epsilon$ modifié	GRI 3
Modèle 4	Modèle de flammelette	k- $\epsilon$ modifié	GRI 2.11
Modèle 5	Modèle de flammelette	k- $\epsilon$ standard	GRI 3
Modèle 6	Modèle de flammelette	k- $\epsilon$ standard	GRI 2.11

**Tableau III.1:** Les modèles utilisés

Les distributions radiales et axiales de la température et les fractions massiques de certaines espèces produites par les modèles décrits dans le tableau III.1 avec ceux publiés par Bergmann et al. [85] ont été comparés.

### 1.1. Présentation de la configuration

La configuration adoptée par Bergmann et al. [85] et reprise par Tabet-Helal et al. [86] pour l'étude de son modèle numérique est illustrée par la figure III.1. La flamme, comme nous pouvons l'observer est constituée de deux jets axisymétriques de carburant et de comburant (l'air) non pré-mélangés de diamètres  $D$  respectivement égaux à 8 mm et 140 mm.



**Figure III.1 :** Configuration du brûleur

Les caractéristiques du jet de carburant sont regroupées dans le tableau III.2.

Pression [atm]	1
Température d'éjection [K]	300
% CH <sub>4</sub>	22,1
% H <sub>2</sub>	33,2
% N <sub>2</sub>	44,7
Vitesse d'éjection [m.s <sup>-1</sup> ]	42,15

**Tableau III.2:** Caractéristiques du jet de carburant

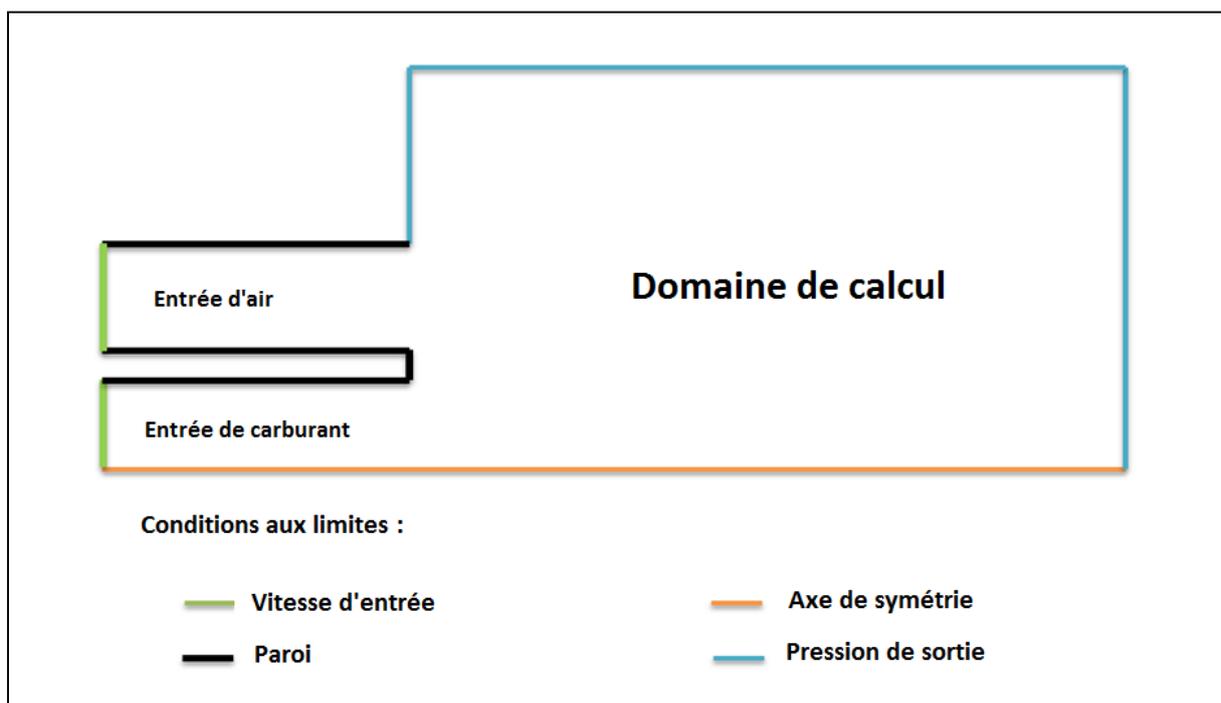
Les caractéristiques du co-courant d'air sont présentées dans le tableau III.3.

Pression [atm]	1
Température d'injection [K]	300
%O <sub>2</sub>	21
% N <sub>2</sub>	79
Vitesse du co-courant [m.s <sup>-1</sup> ]	0,3

**Tableau III.3:** Caractéristiques du co-courant d'air

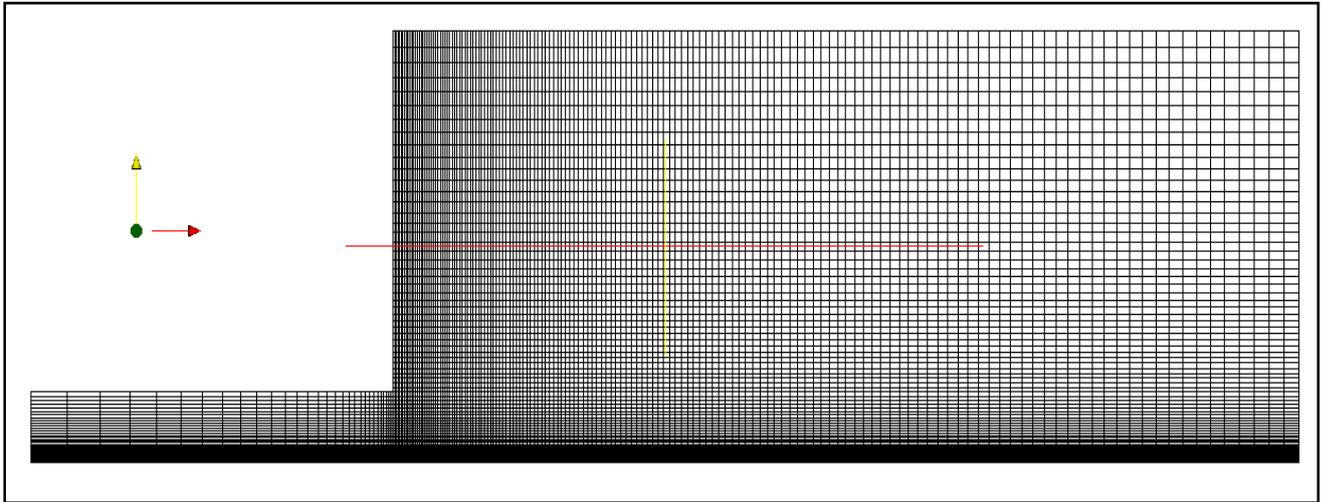
Les équations de Navier-Stokes sont établies pour une configuration axisymétrique. La résolution numérique du système d'équations global obtenu est abordée par la méthode des volumes finis. Le code de calcul commercial Fluent est utilisé. Dans ce code, les schémas centrés pour les termes de diffusion et le « first order upwind » pour les termes de convection sont adoptés. Le couplage de la pression et de la vitesse est considéré avec l'algorithme SIMPLE.

Les conditions aux limites imposées (figure III.2) sont une vitesse d'admission à l'entrée de l'air et du carburant, une condition "paroi" aux parois du brûleur, une condition d'axe de symétrie le long de la ligne d'axe et une condition de pression à la sortie du brûleur.



**Figure III.2 :** Configuration du domaine de calcul.

Un maillage structuré non uniforme comprenant 16400 cellules (figure III.3) est utilisé dans le cadre de ce travail. Le maillage est raffiné dans les régions de fort gradient. Le domaine est de 200 mm de large et 2000 mm de long, en considérant le brûleur.



**Figure III.3 :**Vue globale du maillage.

## 1.2. Distribution de la température et des fractions massiques

La distribution radiale de la température en utilisant les modèles consignés dans le tableau III.1, au niveau des sections distantes du bec d'injection de  $x/D = 5$  et  $x/D = 40$  est illustrée par la figure III.4.

La comparaison des courbes théoriques obtenues en utilisant les modèles consignés dans le tableau III.1 avec les mesure expérimentales de la distribution radiale de la température au niveau des sections à  $x/D=5$  et  $x/D=40$  permet de noter que pour la section  $x/D=5$ , tous les modèles surestiment la distribution radiale de la température après la distance  $r/D=1$ . Par ailleurs, nous pouvons remarquer que le modèle de turbulence  $k-\varepsilon$  modifié qui semble le plus approcher les mesures expérimentales sous-estime légèrement la température maximale.

Pour la section  $x/D=40$ , les modèles cités précédemment ( $k-\varepsilon$ ) approchent la température près du centre jusqu'à la distance  $r/D=2$ , mais au-delà de cette valeur ils surestiment la température et l'expansion radiale.

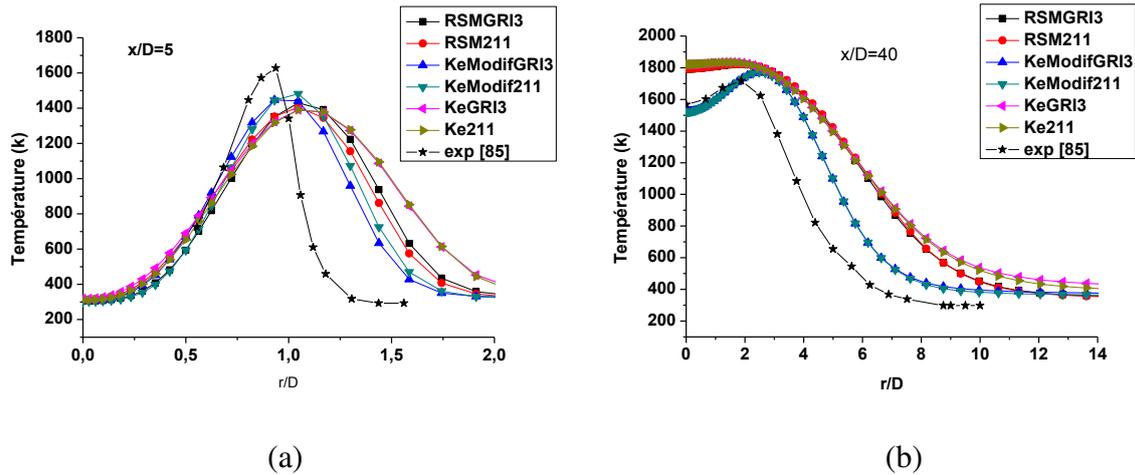


Figure III.4 : Distribution radiale de la température à  $x/D=5$  (a) et à  $x/D=40$  (b)

Pour ce qui est de la prédiction de la fraction massique du méthane, tous les modèles présentent un bon comportement loin du bec de jet (à la section  $x/D = 40$ ), comme nous pouvons le constater sur la figure III.5. Par contre, pour le profil à la section de  $x/D = 5$ , les modèles de turbulence  $k-\epsilon$  et RSM ont échoué dans la prédiction de la fraction de masse de méthane. Il apparaît à cette section que le modèle de turbulence  $k-\epsilon$  modifié a le meilleur comportement et donne des résultats proches des données expérimentales de Bergmann et al. [85].

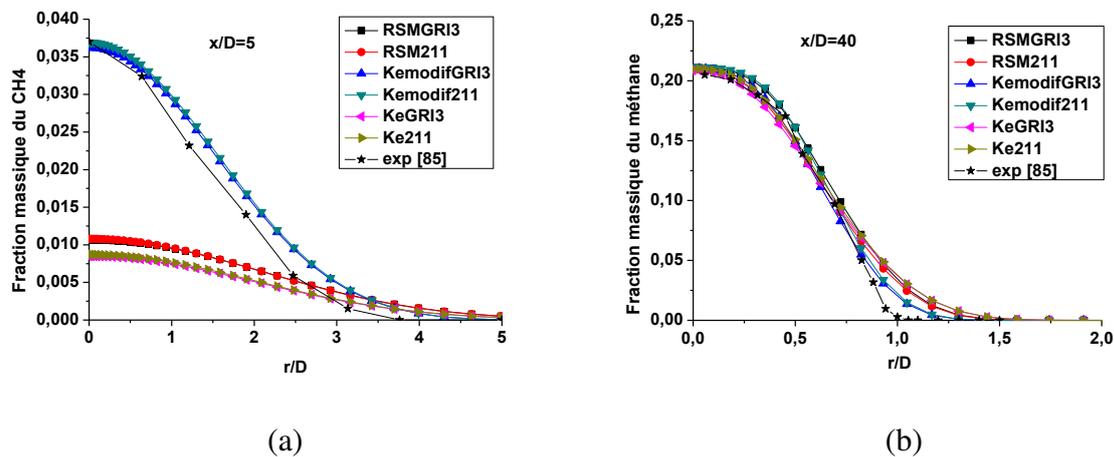
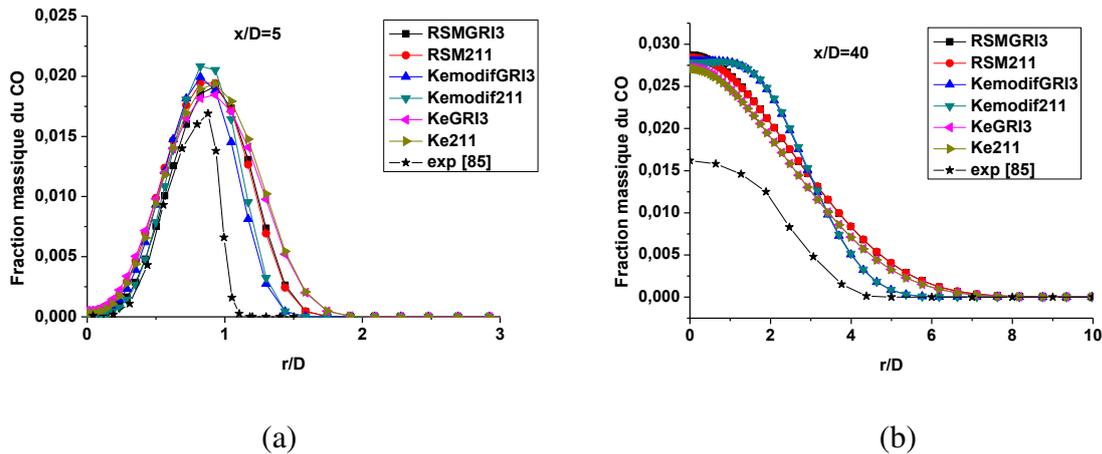


Figure III.5 : Distribution radiale de la fraction massique du CH<sub>4</sub> à différentes sections (Résultats de simulation et expérimentaux)

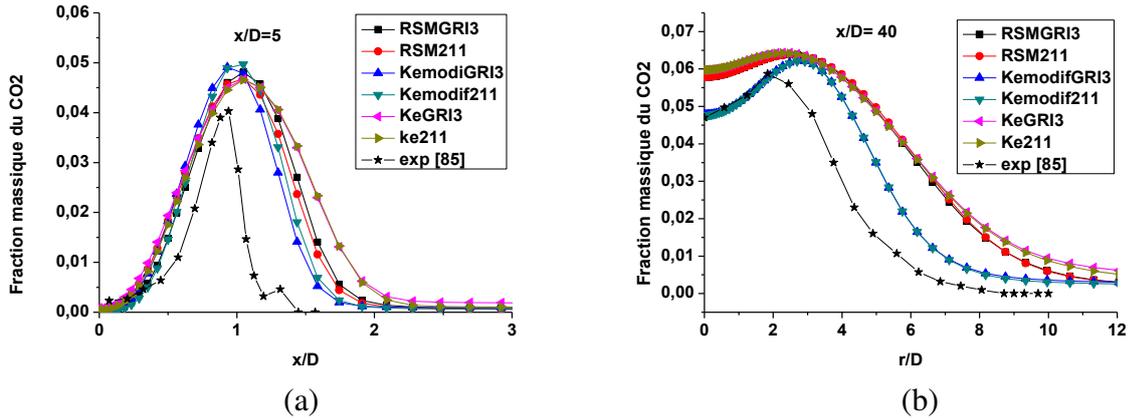
La répartition radiale de la fraction massique de CO pour les sections à  $x/D=5$  et à  $x/D=40$ , en utilisant les modèles consignés dans le tableau III.1 est représentée par les courbes de la figure III.6. L'examen de ces courbes permet de noter que pour la première section ( $x/D=5$ )

tous les modèle approchent de manière équivalente la courbe expérimentale jusqu'à la distance  $r/D=1$ , au-delà de cette valeur tous les modèles surestiment l'expansion radiale, mais dans une moindre mesure pour les modèles utilisant le modèles de turbulence k- $\epsilon$  modifié. Pour la section  $x/D=40$ , tous les modèles surestiment la fraction massique de CO jusqu'à la distance  $r/D= 4.5$ .



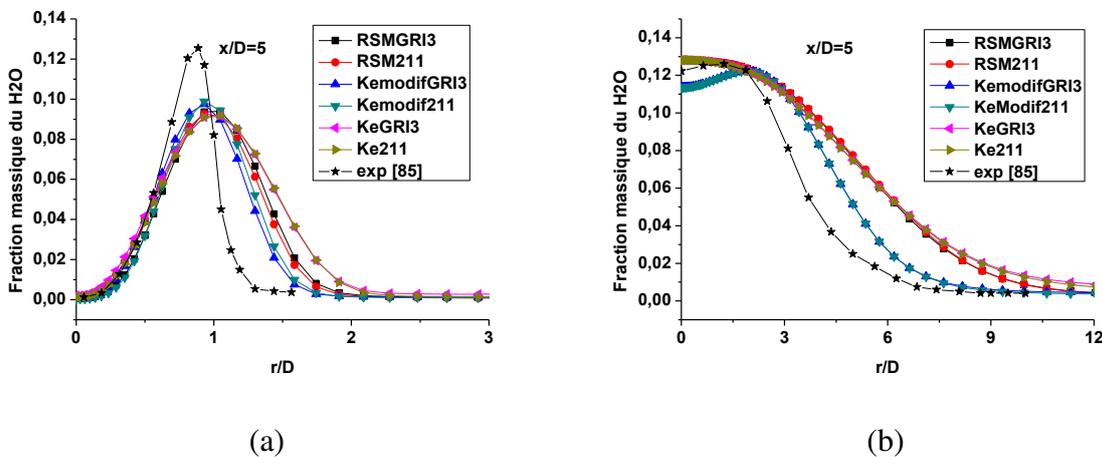
**Figure III.6 :** Distribution radiale de la fraction massique du CO à  $x/D=5$  (a) et à  $x/D=40$  (b)

La figure III.7 représente la distribution radiale de la fraction massique du  $\text{CO}_2$  obtenue par simulation, en utilisant les modèles consignés dans le tableau III.1. Il est aisé de remarquer, d'une part que pour la section à  $x/D=5$  tous les modèles donnent des résultats proches et d'autre part qu'il y a surestimation de la fraction massique du  $\text{CO}_2$  au-delà de la distance  $r/D=1$  pour tous les cas. Pour la section à  $x/D=40$ , les résultats donnés par les modèles utilisant le modèles de turbulence k- $\epsilon$  modifié se superposent avec ceux obtenus par l'étude expérimentale de Bergmann et al. [85], jusqu'à la distance radiale  $r/D=2$ . Au-delà, de cette valeur tous les modèles surestiment la fraction massique du  $\text{CO}_2$ , même si les résultats des modèles utilisant le modèle de turbulence k- $\epsilon$  modifié semblent les plus proches des résultats expérimentaux.



**Figure III.7 :** Distribution radiale de la fraction massique du CO<sub>2</sub> à  $x/D=5$  (a) et à  $x/D=40$  (b)

La distribution radiale de la fraction massique de l'eau à deux sections  $x/D = 5$  et  $x/D = 40$  a été examinée. Il apparaît clairement sur la figure III.8 que tous les modèles utilisés approchent les résultats expérimentaux jusqu'à  $r/D=0.75$ , sous-estiment la fraction massique de l'eau, entre  $r/D=0.75$  et  $r/D=1$ , surestiment cette dernière au-delà de  $r/D=1$ .



**Figure III.8:** Distribution radiale de la fraction massique du H<sub>2</sub>O à  $x/D=5$ (a) et à  $x/D=40$  (b)

L'analyse des résultats de l'étude comparative des six modèles utilisés (tableau III.1), permet de noter que le modèle de turbulence k- $\epsilon$  modifiée est le plus appropriée pour la simulation numérique de notre flamme utilisés avec les deux schémas cinétique le GRI 2.11 et le GRI 3 pour la simulation d'une flamme de diffusion turbulente du mélanges hydrogène/méthane avec l'approche de PDF en utilisant le modèle de flammelettes. Même si les deux modèles utilisant le modèle de turbulence k- $\epsilon$  modifié donnent des résultats très

proches le modèle avec le schéma cinétique GRI 2.11 sera retenu dans le cadre de notre travail.

En effet, le schéma cinétique GRI 2.11 compte 49 espèces et 277 réactions élémentaires alors que GRI 3 compte 53 espèces et 325 réactions, ce qui implique que ce dernier nécessite plus de temps de calcul pour mener les simulations.

## 2. Effet de l'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulente

Dans cette partie, notre attention porte sur l'étude de l'effet de l'addition d'hydrogène sur la flamme de diffusion turbulente, objet de ce travail, en utilisant la modélisation physique et numérique précitée (paragraphe 1) ainsi que le modèle de turbulence et le schéma cinétique choisi. La fraction molaire d'hydrogène est variée entre 0 et 50% avec un pas de 10% et tous les autres paramètres du jet de combustible et d'air sont maintenus inchangés et égaux à ceux donnés dans les tableaux III.2 et III.3.

Fraction volumique d'hydrogène (%)	Fraction massique d'hydrogène (%)	Fraction massique du méthane (%)	Débit massique du carburant (kg/s)	Vitesse du jet (m/s)
0	0	100	7,80E-04	21,36359
10	1,377	98,623	7,43E-04	22,28615
20	3,046	96,954	7,03E-04	23,34479
30	5,11	94,89	6,62E-04	24,57727
40	7,73	92,27	6,18E-04	26,03824
50	11,163	88,837	5,85E-04	28,50149

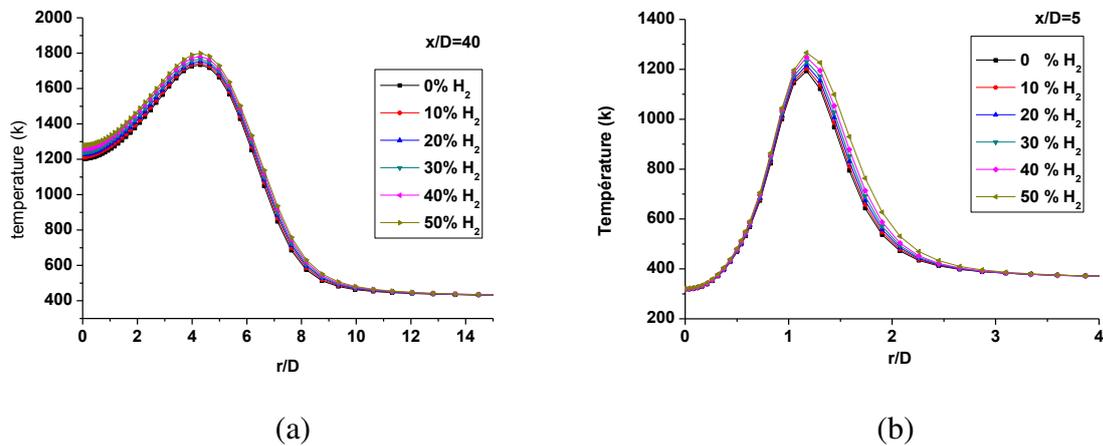
**Tableau III.4:** Caractéristiques des jets pour chaque fraction d'hydrogène

Les caractéristiques des six jets ayant fait objet de cette étude sont regroupées dans le tableau III.4. L'analyse des valeurs permet de noter que lorsque de l'hydrogène est introduit dans le méthane à la hauteur de 50% en fraction volumique, la masse d'hydrogène dans le mélange ne représente que 11,163% de la masse totale. En outre l'introduction de l'hydrogène dans le méthane réduit le débit massique passant à travers le brûleur.

Néanmoins, la vitesse du jet augmente même si le débit massique est réduit par l'introduction d'hydrogène. Un accroissement de près de 28% de la vitesse est observé quand la fraction volumique de l'hydrogène varie de 0 à 50%.

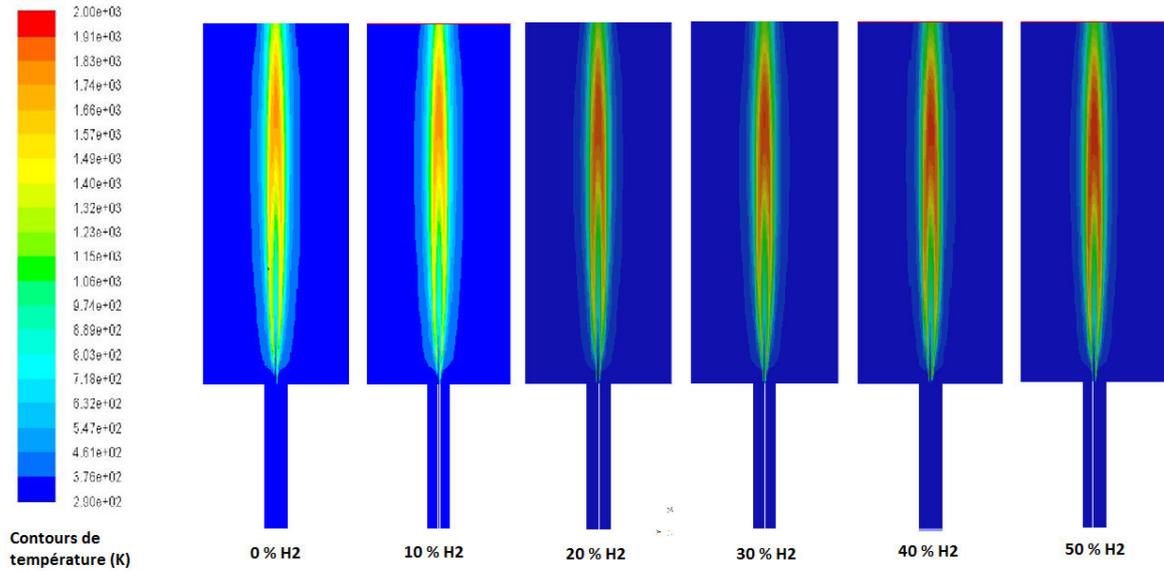
Les résultats de simulation des six cas de combustion turbulente non-pré-mélangée d'hydrogène/méthane sont obtenus à l'aide du code Fluent.

La distribution radiale de la température aux sections  $x/D=5$  et  $x/D=40$  obtenue pour les cas consignés dans le tableau III.4 est représentée respectivement par les courbes (a) et (b) de la figure III.9. Il est aisé de remarquer que les distributions radiales pour les six modèles présentent la même allure. Nous pouvons également noter que l'augmentation du taux d'hydrogène dans le méthane conduit à un accroissement de la température, du fait que la température de combustion de l'hydrogène est supérieure à celle du méthane. Cette tendance est rapportée par Kumar et Mishra [87, 88,89] dans une étude expérimentale de la combustion du mélange GPL/H<sub>2</sub> et Wang et al. [15] dans une étude numérique de la combustion du mélange CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>.



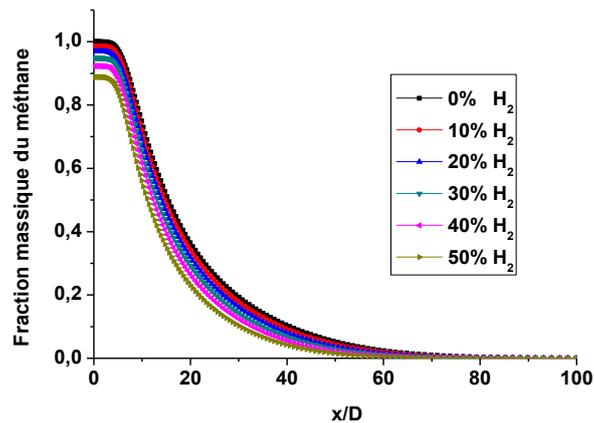
**Figure III.9 :** Distribution radiale de la température à la section  $x/D = 5$  (a), et à  $x/D = 40$  (b).

La figure III.10 illustre les iso-contours de la température pour les six flammes dont les caractéristiques sont données dans le tableau III.4. On remarque que l'introduction de l'hydrogène réduit la taille de la flamme dans les sens radial et axial. Ainsi, une flamme plus courte et plus fine est obtenue. Cette dernière est en outre plus intense (l'augmentation de la proportion d'hydrogène provoque une élévation de la température).



**Figure III.10 :** Iso-contours de température

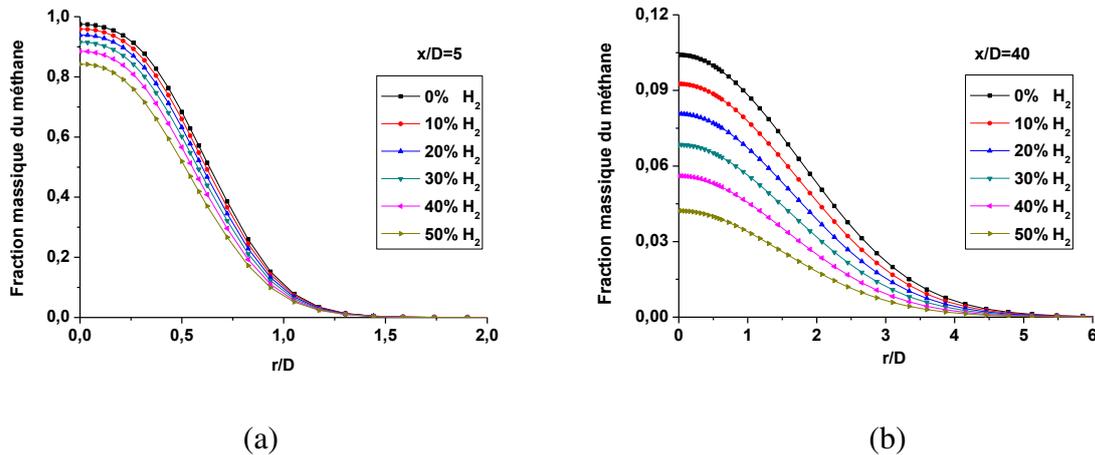
L'effet de la proportion d'hydrogène sur la distribution axiale de la fraction massique du méthane est mis en évidence par les courbes de la figure III.11. La quantité de méthane à  $x/D=0$ , est différente d'une courbe à une autre, du fait que l'introduction d'une quantité donnée d'hydrogène celle du méthane est réduit naturellement. Par ailleurs, Il est aisé de remarquer que les courbes décroissent plus rapidement avec l'augmentation du taux d'hydrogène. En effet, l'introduction de l'hydrogène augmente la vitesse de consommation du méthane.



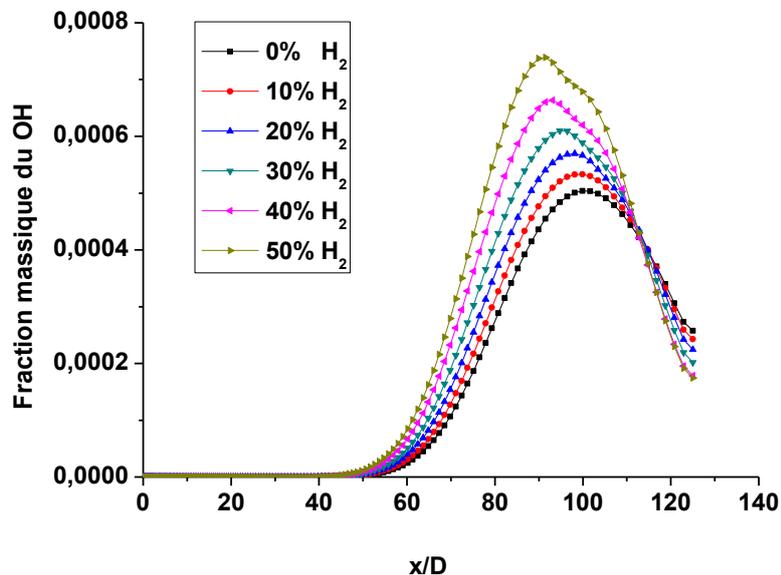
**Figure III.11 :** Distribution axiale de la fraction massique du méthane pour différentes proportions d'hydrogène

L'observation des courbes de la figure III.12 (a) et (b) représentant respectivement les distributions radiales de la fraction massique du méthane des flammes (tableau III.4) aux sections  $x/D=5$  et  $x/D=40$  pour différentes proportions d'hydrogène conduit aux mêmes

remarques que pour les courbes de la figure III.11. Il apparaît clairement que pour les deux sections, l'introduction d'hydrogène réduit la quantité de méthane au centre de la flamme. On remarque aussi que l'introduction de l'hydrogène provoque l'accélération de la consommation de ce dernier. La figure III.13 illustre bien ce fait (accélération de la réaction et de son initiations).



**Figure III.12 :** Distribution radiale de la fraction massique du méthane à  $x/D=5$  et à  $x/D=40$ .

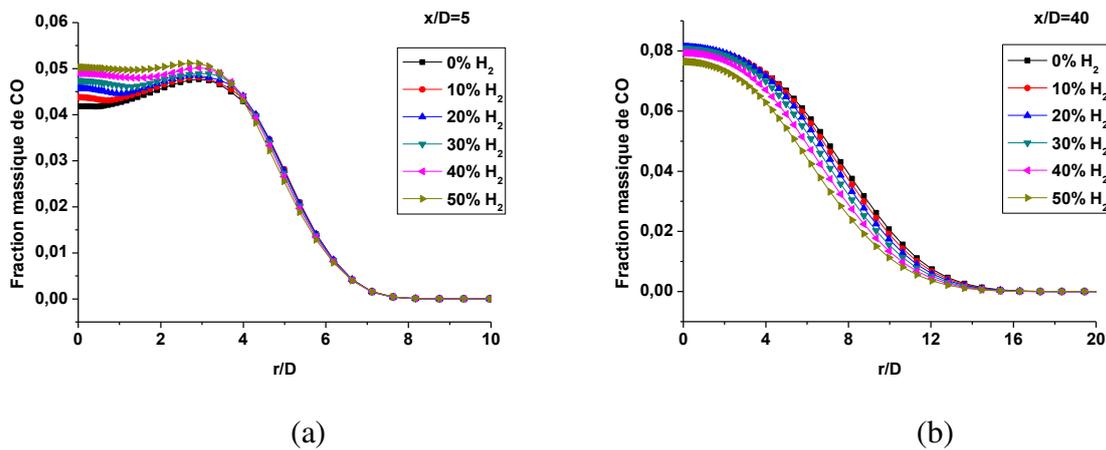


**Figure III.13 :** Distribution axiale de la fraction massique du OH pour différentes proportions d'hydrogène

En effet, l'examen de la figure III.13, illustrant la répartition axiale de la fraction massique du OH pour les flammes dont les caractéristiques sont consignées dans le tableau III.4, permet

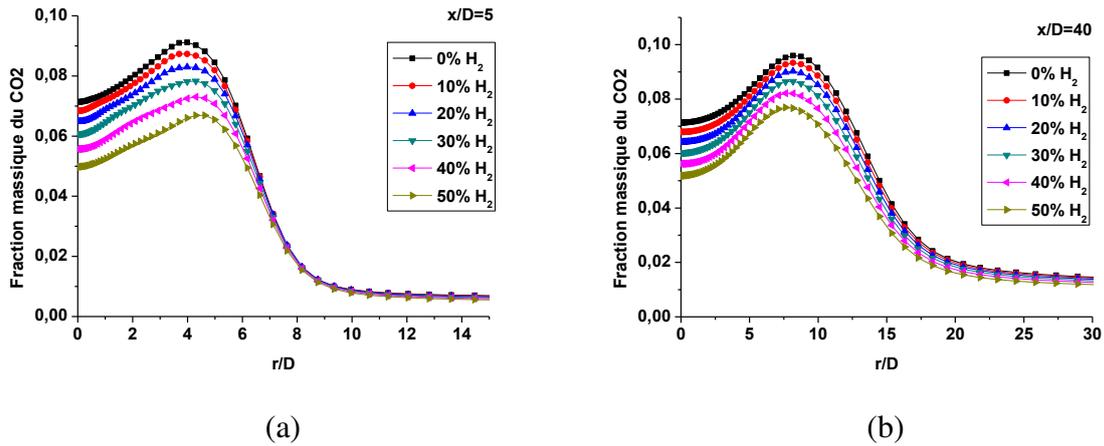
de noter que l'ajout d'hydrogène conduit à l'apparition du OH à une distance plus courte de la section du jet, ainsi qu'à une augmentation plus rapide de la concentration d'OH. Néanmoins, le maximum atteint, une décroissance rapide est alors observée. Cela indique qu'avec l'introduction d'hydrogène, la zone de réaction intervient non seulement plus tôt dans mais devient plus intense, ce qui explique la consommation plus rapide du carburant et l'augmentation de la température avec l'ajout de l'hydrogène.

La distribution radiale de la fraction massique du monoxyde de carbone aux sections  $x/D=5$  et  $x/D=40$ , pour les différents cas cités dans le tableau III.4 est illustrée par la figure III.14. On peut observer sur cette figure que la fraction massique du monoxyde de carbone augmente avec l'accroissement de la fraction d'hydrogène à la section  $x/D = 5$ , à l'opposé de la section  $x/D = 40$ .



**Figure III.14 :** Distribution radiale de fraction massique de CO aux sections  $x/D = 5$  et  $x/D = 40$ .

Un comportement similaire est observé pour la distribution radiale de la fraction massique du dioxyde de carbone. En effet à la section  $x/D = 5$ , l'ajout d'hydrogène provoque une augmentation de la fraction massique du  $\text{CO}_2$ , à l'opposé de la section  $x/D=40$  (figure III.15).

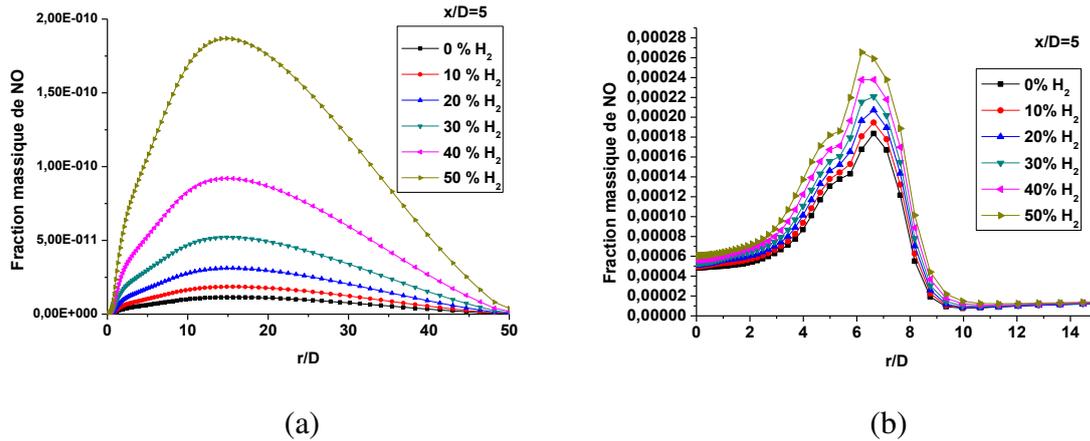


**Figure III.15 :** Distribution radiale de fraction massique de  $\text{CO}_2$  aux sections  $x/D = 5$  et  $x/D = 40$ .

Une explication pour un tel comportement peut être avancée. A la section  $x/D=40$ , la réduction des fractions massiques du monoxyde et du dioxyde de carbone s'explique par la réduction de la fraction méthane et par conséquent, la réduction de production du monoxyde et du dioxyde de carbone. L'hydrogène ne contient pas de carbone, le méthane représente l'apport en carbone dans cette flamme.

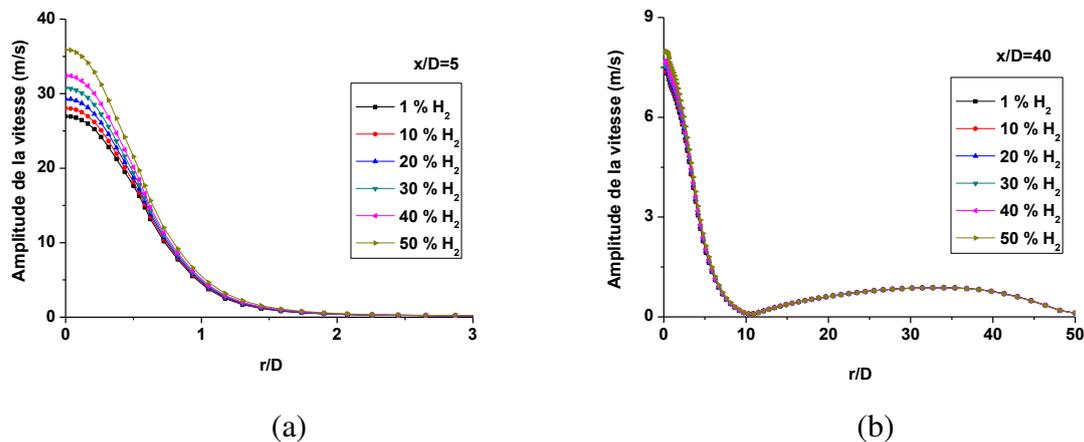
En ce qui concerne la section  $x/D=5$ , l'augmentation de la fraction massique du monoxyde de carbone et du dioxyde de carbone est due à la modification de la structure de la flamme par l'accélération de la combustion du mélange et de la consommation plus rapide du combustible. Il en résulte, une production plus importante de monoxyde et de dioxyde de carbone dans les sections proches du bec d'injection.

Une autre substance polluante, non moins importante est le monoxyde d'azote. La répartition radiale de la fraction massique du monoxyde d'azote pour les cas étudiés dans le cadre de ce travail, et dont les caractéristiques sont consignées dans le tableau III.4, est représentée sur la figure III.16. Il est aisé de remarquer que l'ajout d'hydrogène provoque une augmentation de la concentration du monoxyde d'azote pour les deux sections. Ceci peut être expliqué par le fait que l'ajout d'hydrogène provoque une hausse de la température qui favorise la production d'oxyde d'azote. Notons que pour la section  $x/D=5$ , la différence de concentration est plus importante car la réaction est initiée plus tôt avec l'ajout d'hydrogène.



**Figure III.16 :** Distribution radiale de fraction massique de NO aux sections  $x/D = 5$  et  $x/D = 40$ .

La distribution radiale de la vitesse d'écoulement des jets dont les caractéristiques sont données dans le tableau III.4, est illustrée par les courbes de la figure III.17. Nous pouvons remarquer, pour les deux sections (à  $x/D=5$  et à  $x/D=40$ ), d'une part que l'ajout d'hydrogène provoque une augmentation de la vitesse d'écoulement des jets près de l'axe du jet et que d'autre part les courbes se rejoignent plus loin. Le jet de carburant qui se trouve au centre du brûleur dont la vitesse moyenne d'environ 25 m/s, est ralenti à l'entrée du brûleur par le co-courant d'air de vitesse plus faible (0.3 m/s).



**Figure III.17 :** Distribution radiale de l'amplitude de la vitesse aux sections  $x/D = 5$  et  $x/D = 40$ .

Sur la figure III.18, est illustrée la distribution axiale de la vitesse d'écoulement des gaz en réaction pour les cas consignés dans le tableau III.4. Nous pouvons remarquer que la vitesse est plus importante pour les mélange contenant plus d'hydrogène au départ. Ce

comportement a été noté précédemment (tableau III.4). En outre, il apparaît que les courbes se rejoignent plus loin dans l'écoulement.

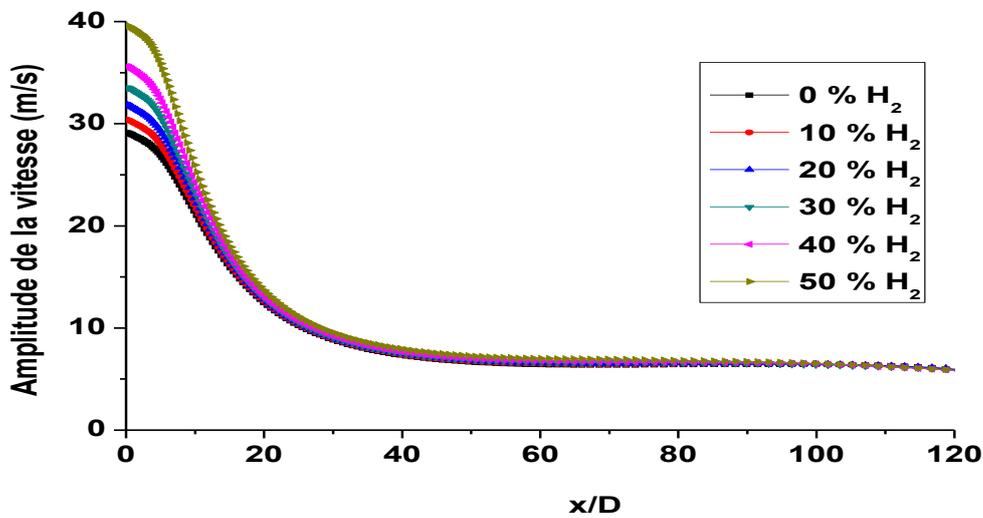


Figure III.18 : Distribution axiale de l'amplitude de la vitesse pour différents taux d'hydrogène

### 3. Effet de l'hydrogène sur la puissance et la production de polluants

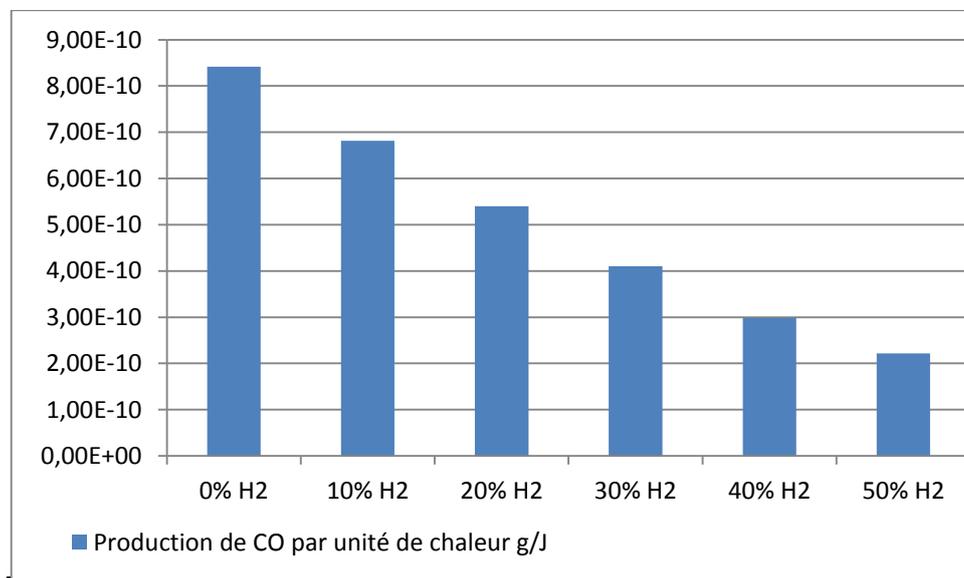
Les valeurs du débit massique pour les différentes fractions d'hydrogène utilisées (tableau III.4) et les puissances produites par la flamme pour chaque cas, sont consignées dans le tableau III.5. Il apparaît clairement que l'introduction d'hydrogène (de densité plus faible) réduit le débit massique de l'ensemble du carburant. Ainsi en augmentant la proportion d'hydrogène de 0% à 50% dans le méthane, le débit massique est réduit de 7,80E-04 kg/s à 5,85E-04 kg/s soit une baisse de 25%. Il en résulte également une réduction de la puissance thermique produite par la flamme, de 39027,804 Watts à 33913,0278, soit une réduction approximative de 13%, (un impact deux fois moins important sur la production de puissance par la flamme, et ce du fait que l'hydrogène possède un pouvoir calorifique deux fois plus important que celui du méthane).

Il est à noter que le fluide qui circule à l'intérieur du brûleur a une densité moins importante avec l'introduction de l'hydrogène, mais la puissance véhiculée par ce fluide n'est pas réduite dans les mêmes proportions. Ces deux faits conjugués font que la densité d'énergie par unité de masse est plus importante, ce qui se remarque par l'augmentation de la température dans la flamme.

Fraction volumique d'hydrogène (%)	Débit massique du carburant (kg/s)	Puissance produite par la flamme (W)
0	7,80E-04	39027,804
10	7,43E-04	37872,2226
20	7,03E-04	36697,4135
30	6,62E-04	35501,7393
40	6,18E-04	34297,7512
50	5,85E-04	33913,0278

**Tableau III.5 :** Débits massiques de carburant et puissances de flammes pour différentes fractions volumiques d'hydrogène

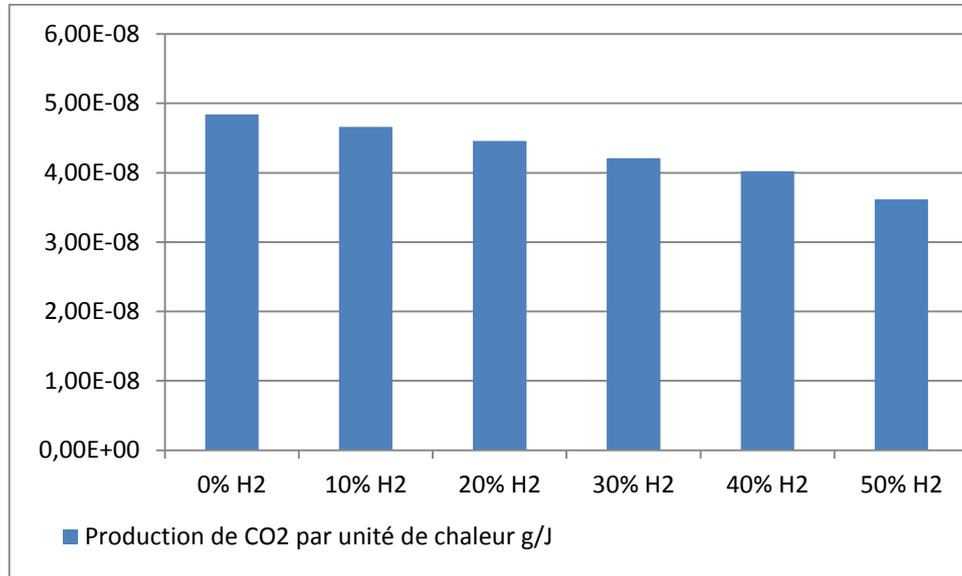
La quantité de monoxyde de carbone produite par unité de chaleur, par les flammes dont les caractéristiques sont données dans le tableau III.4 est illustrée par la figure III.19, Nous pouvons constater que la quantité de monoxyde produite par joule pour un ajout d'hydrogène de 50% est quatre fois moins que celle dans le cas de 0% d'hydrogène dans le méthane.



**Figure III.19 :** Quantité de CO produite par unité de chaleur pour différentes fractions volumiques d'hydrogène

Concernant la quantité de dioxyde de carbone produite par unité de chaleur pour différentes proportions d'hydrogène (figure III.20), les remarques précédentes sont observées, excepté que la diminution de CO<sub>2</sub> pour un ajout d'hydrogène de 50% est moins élevée que

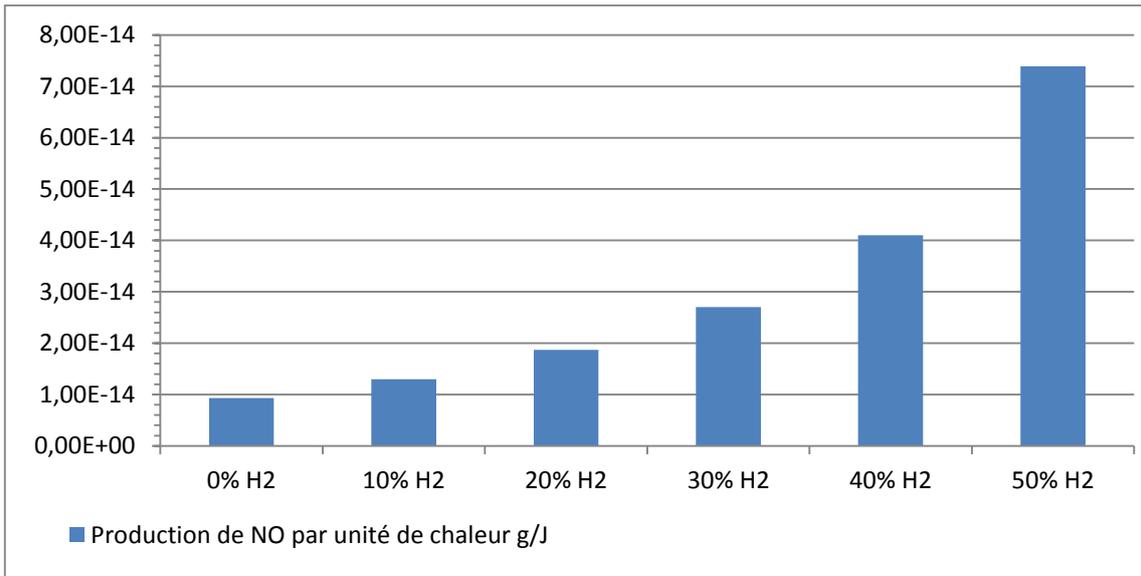
pour le monoxyde de carbone pour le même taux. En effet, dans ce second cas la diminution résulte uniquement d'un moindre taux de carbone dans le carburant (introduction de l'hydrogène) alors que dans le cas du monoxyde de carbone, la combustion est plus complète.



**Figure III.20 :** Quantité de CO<sub>2</sub> produite par unité de chaleur pour différentes fractions volumiques d'hydrogène

Concernant la quantité de monoxyde d'azote produite par unité de chaleur produite par la flamme pour les différents cas consignés dans le tableau III.4, l'examen de la figure III.21, permet de noter que l'introduction de l'hydrogène dans le carburant provoque une augmentation de la quantité de monoxyde d'azote produite qui est d'autant plus élevée que le taux d'hydrogène est grand, (multipliée par sept pour le taux de 50% comparativement à celle pour le taux de 0% d'hydrogène). Cela s'explique par le fait que le monoxyde d'azote résulte essentiellement de l'augmentation de la température de flamme (effet thermique). Par ailleurs, comme en a pu le voir dans la figure III.9, l'introduction de l'hydrogène résulte en une certaine augmentation de la température de flamme.

Ce problème (augmentation de la quantité de monoxyde d'azote produite), pourrait être résolu par l'augmentation de la dilution de la flamme. Cela réduirait la température de cette dernière sans que la qualité de la combustion ne soit affectée, car l'hydrogène favoriserait la stabilisation de la flamme dans ces conditions (faible concentration d'oxygène) comme cela a été rapporté par de nombreux auteurs [89, 90, 91, 92].



**Figure III.21 :** Quantité de NO produite par unité de chaleur pour différentes fractions volumiques d'hydrogène

# **Chapitre IV :**

## **Effet de la pression et de la température**

Dans cette partie de la thèse, l'effet combiné de la pression ambiante et de la température initiale sur la structure et les émissions d'une flamme de diffusion turbulente d'un mélange composé de 20% d'hydrogène et de 80% de méthane, sera examiné.

La simulation numérique entreprise avec le logiciel Fluent aura pour objectif de déterminer l'effet de la pression et de la température sur :

- La distribution de la température de combustion
- La distribution de la fraction massique de monoxyde d'azote NO
- La distribution de la fraction massique de monoxyde de carbone CO
- La vitesse d'écoulement dans la chambre de combustion

## 1. Configuration géométrique

La configuration géométrique adoptée dans ce travail (figure IV.1), est celle utilisée dans l'étude expérimentale de Brookes et Moss [44]. La flamme se compose de deux jets axisymétriques d'air et de carburant non-prémélangés. Les diamètres des jets de carburant et d'air sont respectivement,  $D= 4,07\text{mm}$  et  $d =155 \text{ mm}$ . Le brûleur comporte un brûleur à prémélange annulaire de  $0,16 \text{ mm}$  de largeur.

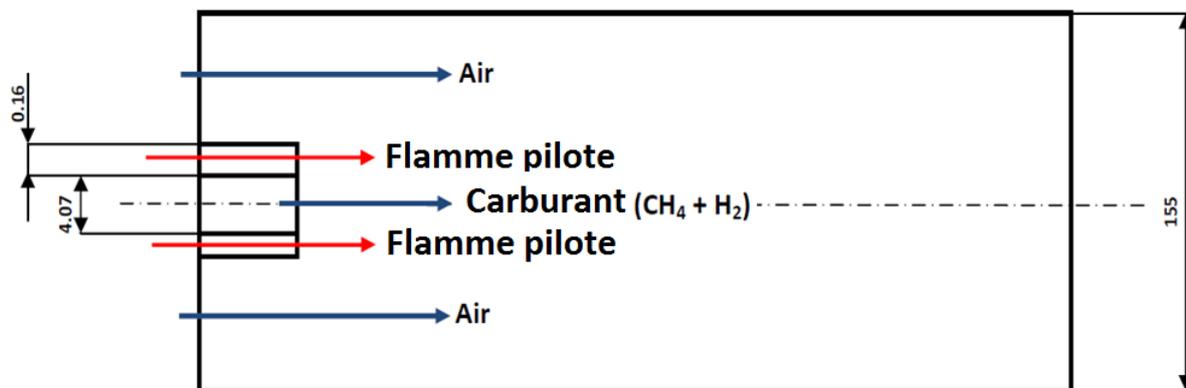


Figure IV.1: Configuration géométrique.

## 2. Approches de la modélisation numérique

Le modèle de flammelettes avec le mécanisme cinétique détaillé GRI2.11 est utilisé pour la simulation de la combustion. L'approche RANS (Reynolds moyennées de Navier-Stokes), en utilisant le modèle k- $\epsilon$  modifié avec  $C_{\epsilon 1} = 1.6$  pour le traitement de la turbulence dans la modélisation numérique est adoptée. Cette configuration a fait l'objet d'une étude comparative dans le chapitre précédent.

Un domaine de calcul axisymétrique bidimensionnel est considéré et les équations de Navier-Stokes abordées par la méthode des volumes finis, sont résolues à l'aide du code commercial Fluent. Le schéma centré pour les termes de diffusion et le schéma amont de premier ordre pour les termes de convection sont utilisés. L'algorithme Simple est adopté pour le couplage vitesse-pression. Les conditions aux limites imposées sont le débit massique d'air et de carburant et la condition de pression à la sortie.

## 3. Domaine de calcul et conditions aux limites

Dans la section du jet principal et au niveau du co-courant, une condition de vitesse est imposée. Une condition de pression type « pressure outlet » est considérée pour la section de sortie. Une condition de symétrie est utilisée pour l'axe de l'injecteur et du jet. Les parois de l'injecteur sont supposées adiabatiques. La condition de paroi 'Wall' est sollicitée pour les parois extérieures.

Un maillage structuré non uniforme, raffiné dans les zones de fort gradient (autour du bec d'injection), est utilisé dans le cadre de ce travail, (figure IV.2).

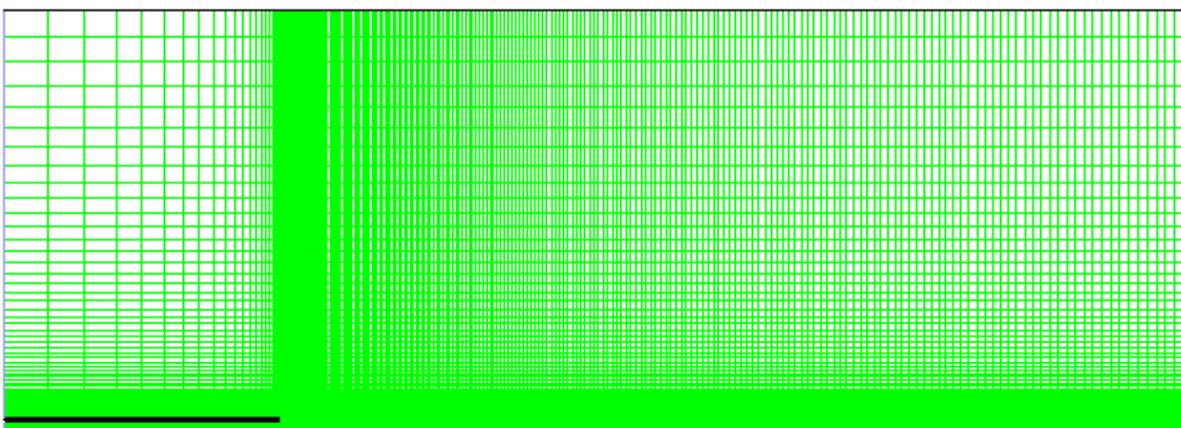


Figure IV.2 : Aperçu d'une partie du maillage

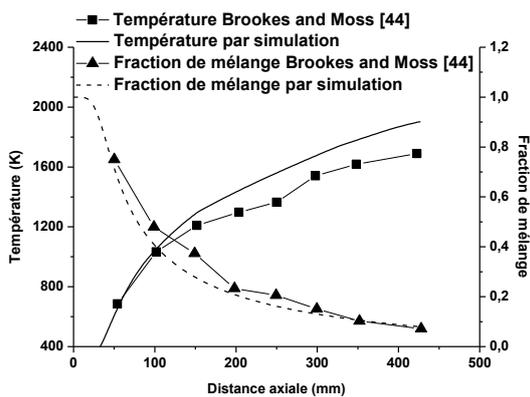
#### 4. Validation de la modélisation numérique

Avant d'étudier l'effet de la température initiale, il est nécessaire de valider le modèle numérique utilisé. Pour ce faire, les résultats obtenus par simulation numérique d'une flamme de méthane pur sont comparés à ceux présentés par Brookes et Moss [44]. Les conditions opératoires de la réaction sont indiquées dans le tableau IV.1.

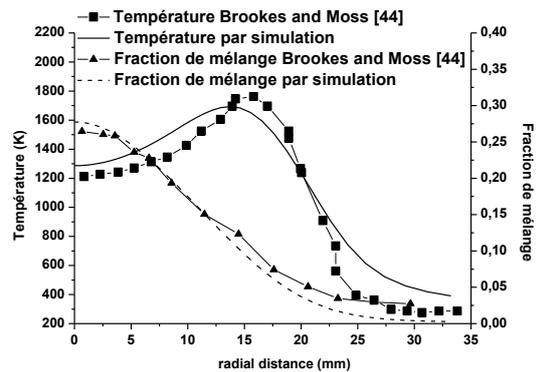
Pression absolue (atm)	1
Débit de carburant ( $\text{g}\cdot\text{min}^{-1}$ )	10.3
Débit d'air ( $\text{g}\cdot\text{min}^{-1}$ )	708
Température du carburant ( $^{\circ}\text{C}$ )	17
Température de l'air ( $^{\circ}\text{C}$ )	17
Vitesse de jet du carburant ( $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ )	20.3
Nombre de Reynolds du jet	5000

Tableau IV.1: Conditions opératoires

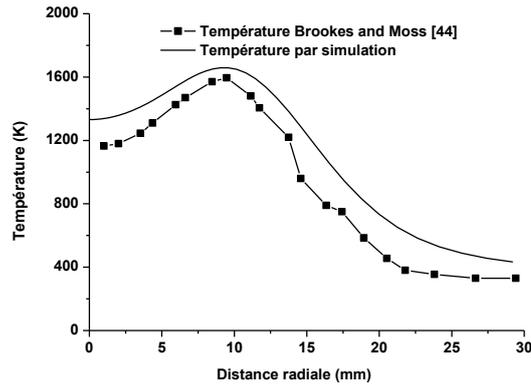
La flamme pilote est une flamme prémélangée riche en méthane et en oxygène, avec un débit de méthane égale à 2% du débit du combustible principal.



(a)



(b)



(c)

**Figure IV.3 :**(a) Température axiale et fraction de mélange pour 1 atm, (b) Distribution radiale de la température et de la fraction de mélange pour 1 atm à 150 mm, (c) Distribution radiale de la température pour 3 atm à 150 mm

Les distributions axiale et radiale de la température aux pressions de 1 et 3 atm et la fraction du mélange à la pression de 1 atm pour le cas simulé avec notre modèle et les résultats expérimentaux publiés par Brookes et Moss [44] sont reportés sur la figure IV.3. Il apparaît un bon accord entre les courbes obtenues par simulation et celles issues des expériences de Brookes et Moss [44].

## 5. Effet de la pression ambiante et de la température initiale

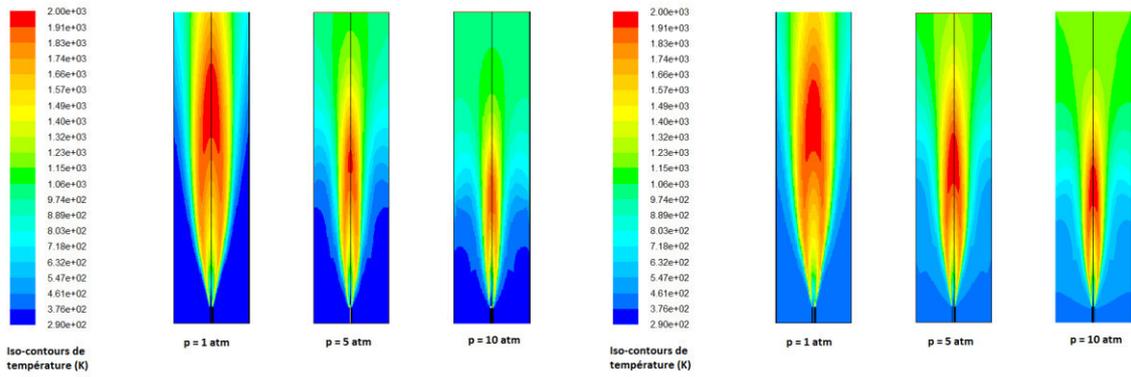
Dans cette section, nous nous sommes intéressés à l'effet de la température initiale et de la pression ambiante sur la structure de trois flammes de diffusion turbulente avec des taux volumiques d'hydrogène de 10, 20 et 30%. Les mêmes conditions opératoires pour l'admission que pour les cas présentés dans le tableau IV.1, à l'exception de la température d'admission de l'air et du carburant et de la pression ambiante à l'intérieur de la chambre de combustion, sont utilisées. La combustion est simulée pour trois températures d'admission  $T_i$  (290 K, 450 K et 600 K) et pour trois pressions ambiantes (1, 5 et 10 atm). En faisant varier le taux d'hydrogène, la pression ambiante et la température initiale, tout en maintenant le même débit massique du carburant, 27 cas différents sont obtenus (tableau VI.2).

Cas	Taux volumique d'hydrogène (%)	Pression (atm)	Température (K)
1	10	1	290
2	10	1	450
3	10	1	600
4	10	5	290
5	10	5	450
6	10	5	600
7	10	10	290
8	10	10	450
9	10	10	600
10	20	1	290
11	2	1	450
12	2	1	600
13	2	5	290
14	2	5	450
15	20	5	600
16	20	10	290
17	20	10	450
18	20	10	600
19	30	1	290
20	30	1	450
21	30	1	600
22	30	5	290
23	30	5	450
24	30	5	600
25	30	10	290
26	30	10	450
27	30	10	600

**Tableau IV.2:** Pression, température et taux d'hydrogène des différents cas étudiés

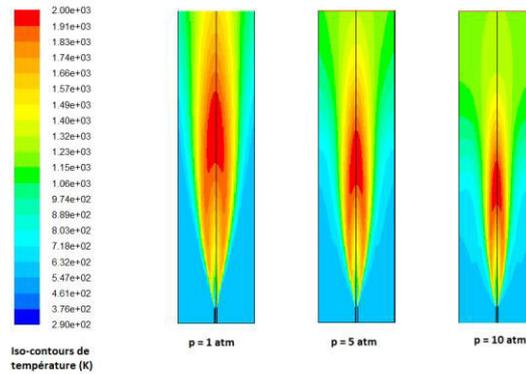
### 5.1. Effet de la pression et de la température initiale sur la structure de la flamme

Dans cette partie les résultats obtenus par simulation des cas cités précédemment sont présentés. L'effet de la température initiale et de la pression ambiante sur la répartition de la température, de la fraction massique du méthane et de la fraction de mélange, sont examinés.



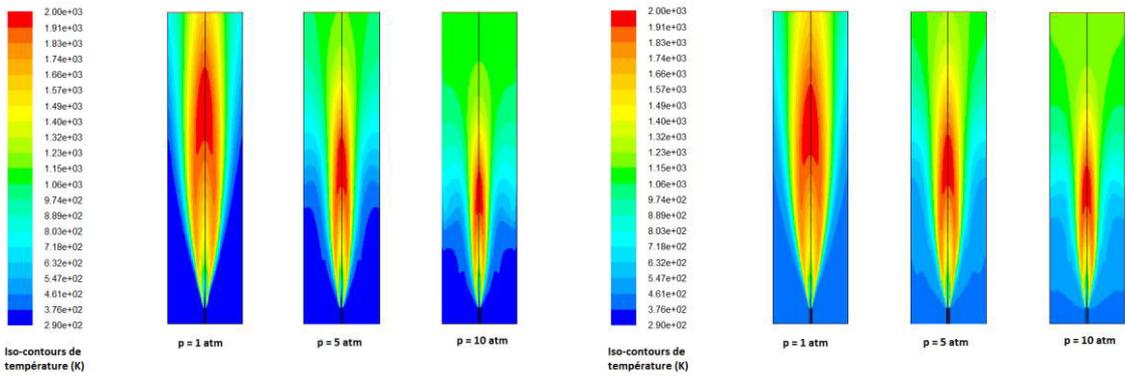
(a):  $T_i = 290$  k

(b):  $T_i = 290$  k



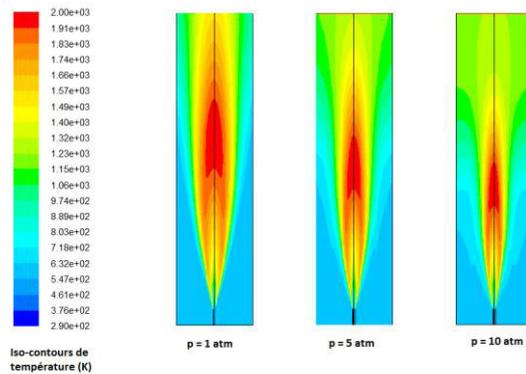
(c):  $T_i = 600$  k

**Figure IV.4 :** Iso-contours de température pour un taux d'hydrogène de 10%



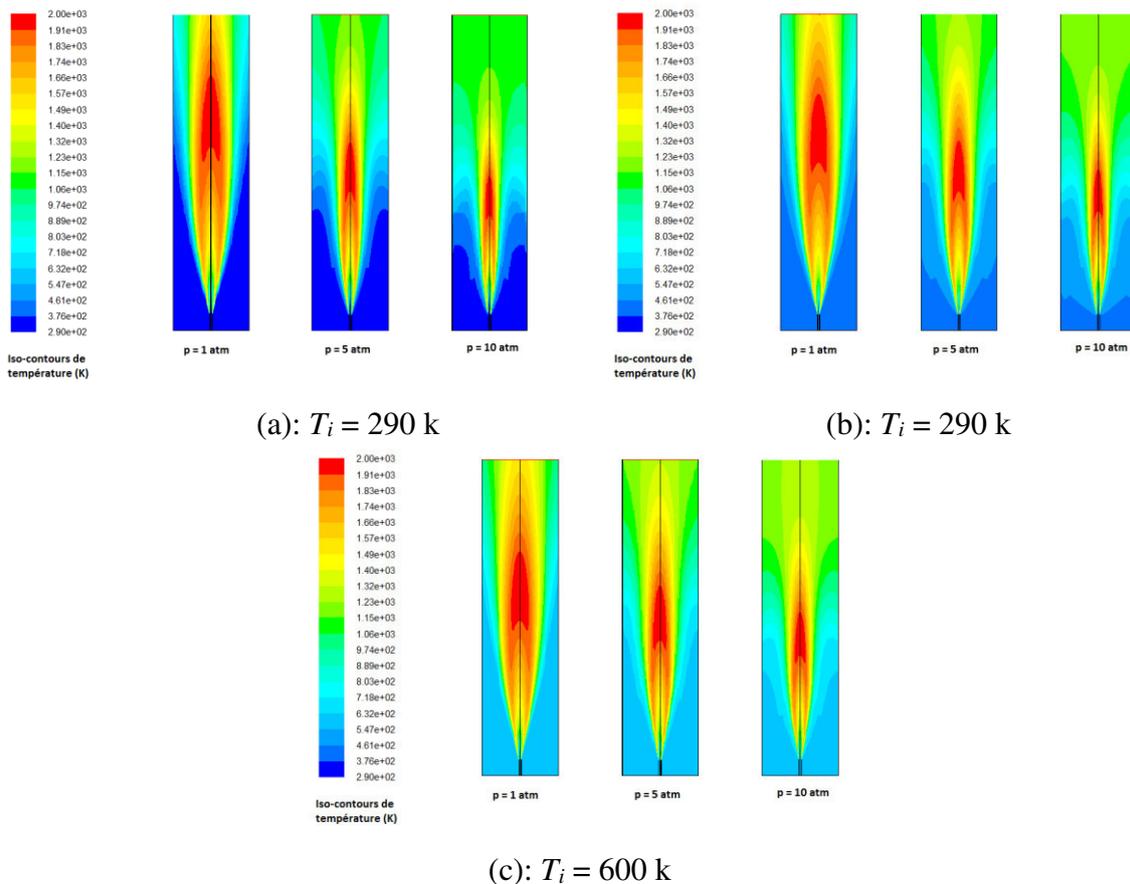
(a):  $T_i = 290$  k

(b):  $T_i = 290$  k



(c):  $T_i = 600$  k

**Figure IV.5 :** Iso-contours de température pour un taux d'hydrogène de 20%



**Figure IV.6 :** Iso-contours de température pour un taux d'hydrogène de 30%

Les iso-contours de température pour les cas simulés (consignés dans le tableau IV.2), respectivement pour des taux d'hydrogène de 10, 20 et 30 % d'hydrogène, sont représentés dans les figures IV.4, IV.5 et IV.6. Il apparaît clairement que dans tous les cas de concentration d'hydrogène et de température initiale, l'augmentation de la pression provoque une réduction de la taille de la flamme dans les sens axial et radial. Cette tendance a été rapportée par certains auteurs [90, 93, 94, 95, 96, 97], qui ont noté un rétrécissement de la flamme (mais pour des flammes avec prémélange). L'augmentation du taux d'hydrogène a pour cause (tel que mentionné dans le chapitre précédent), la réduction de la taille de la flamme. Ce résultat a été également rapporté par Rohani et Saqr [40]. Par ailleurs l'augmentation de la température initiale provoque aussi une réduction de la taille de cette flamme.

La répartition axiale de la température pour les différents cas d'étude et dont les caractéristiques sont données dans le tableau IV.2 est illustrée par la figure IV.7. Nous pouvons remarquer que l'augmentation de la pression ambiante réduit l'expansion axiale de la flamme. Il faut noter que l'augmentation de la température d'admission et du taux d'hydrogène a également le même effet mais dans une moindre mesure. Par ailleurs, il apparaît que l'accroissement du taux d'hydrogène réduit sensiblement l'effet de la pression

sur la distribution axiale de la température mais augmente la température maximale de combustion. Néanmoins l'écart de température se réduit avec l'augmentation de la température initiale.

L'examen des courbes de la figure IV.8 représentant la distribution radiale de la température à la distance de 150 mm de la section de jet pour les cas consignés dans le tableau IV.2 conduit aux observations suivantes :

- L'augmentation du taux d'hydrogène provoque une élévation de la température.
- L'accroissement de la pression réduit l'expansion radiale de la flamme cette dernière est atténué avec l'augmentation de la température initiale. D'autre part on remarque que
- L'élévation de la température initiale induit un accroissement de la température de combustion mais dans une proportion proche de celle de la température initiale.

Les valeurs de la distribution radiale de la température à la distance de 425 mm de la section du jet pour les cas consignés dans le tableau IV.2 sont reportées sur la figure IV.9. Il est aisé de remarquer la réduction de l'expansion radiale avec l'augmentation de la pression. Nous pouvons également constater que pour la section à 150 mm, la température de combustion est d'autant plus importante que le taux d'hydrogène est élevé. Par ailleurs, il apparait que l'augmentation de la température d'admission des gaz, réduit le gradient de température, néanmoins la température décroît moins vite en s'éloignant du la ligne centrale.

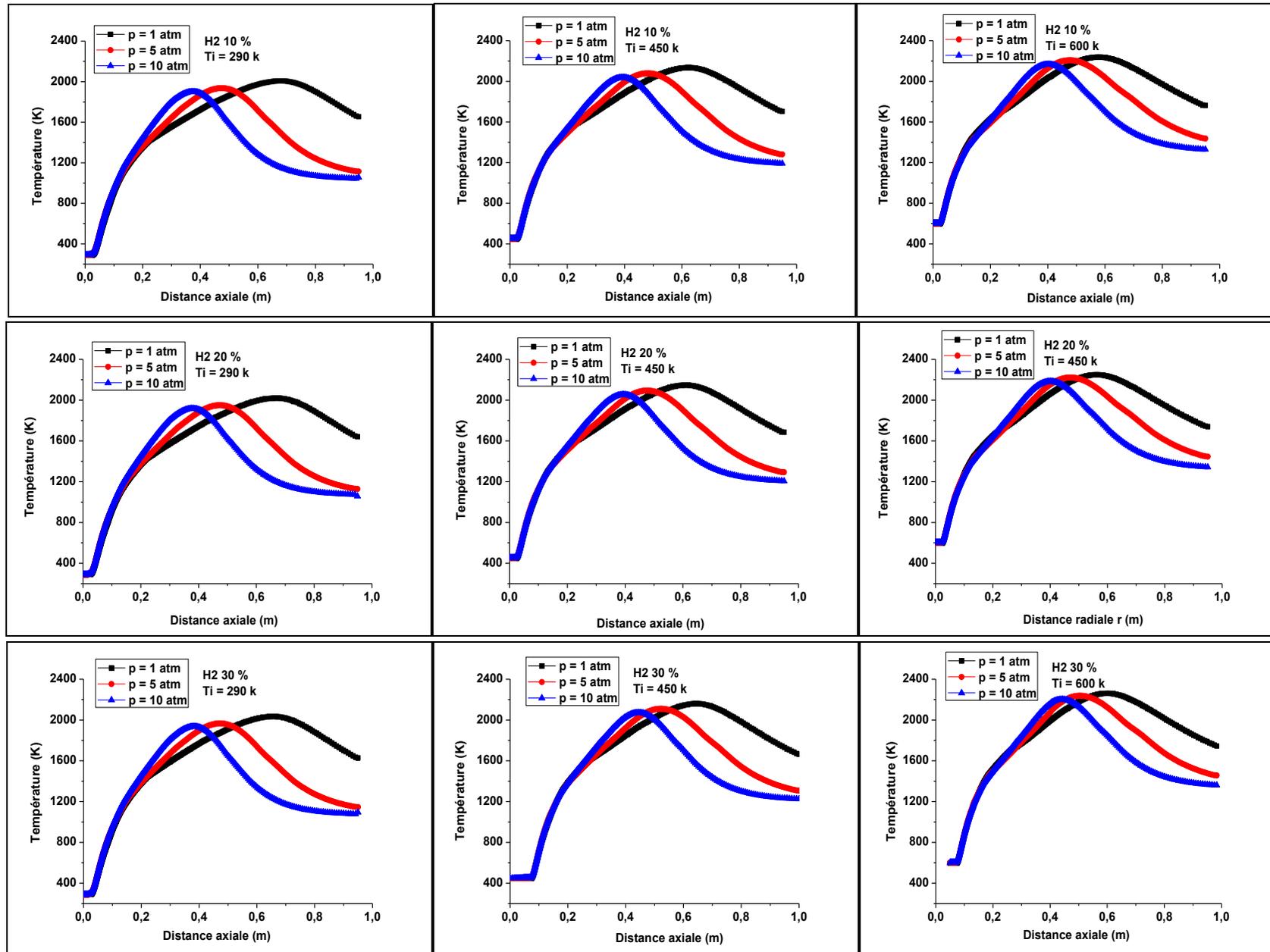


Figure IV.7 : Distribution axiale de la température

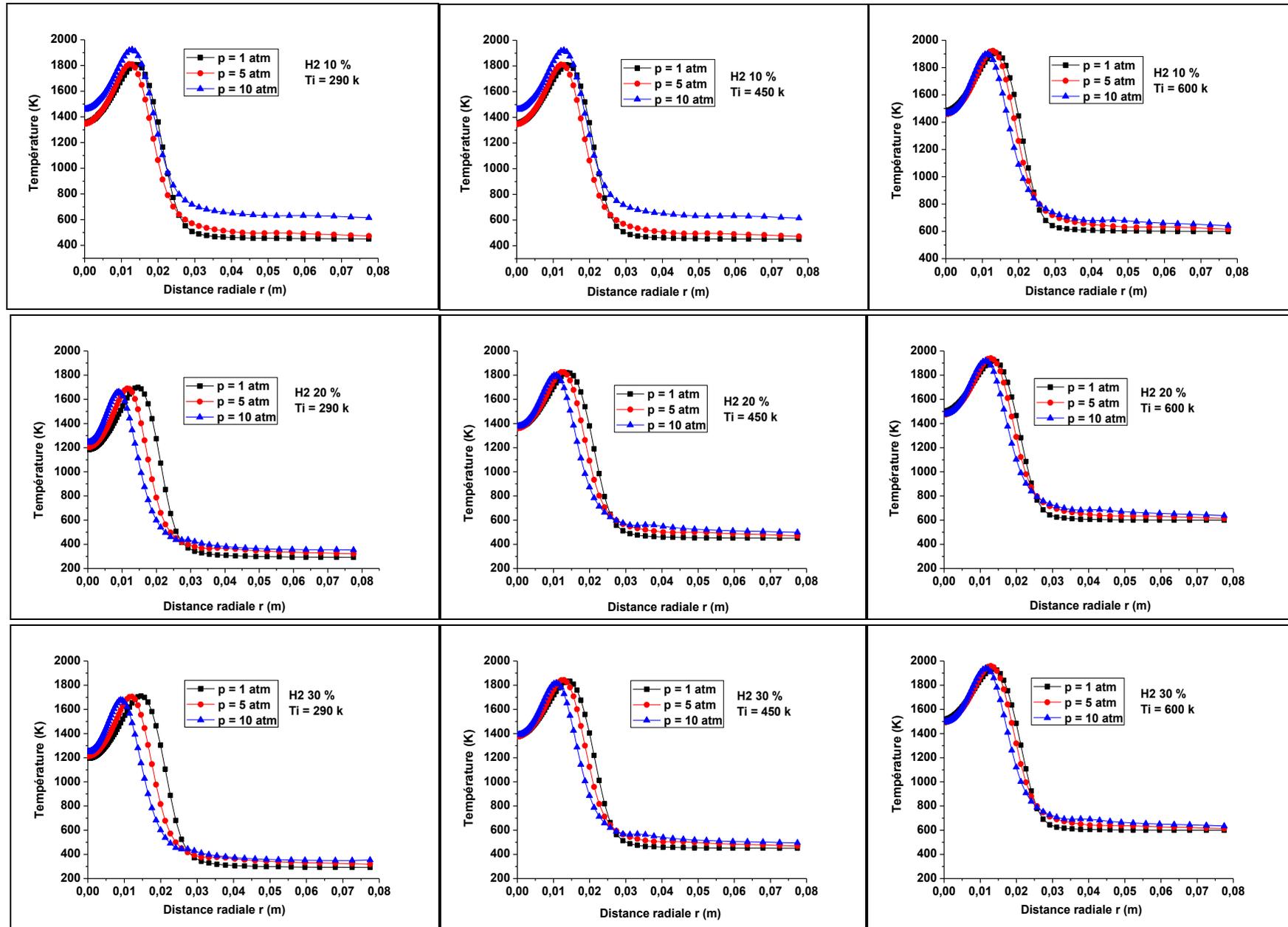


Figure IV.8 : Distribution radiale de la température à 150 mm

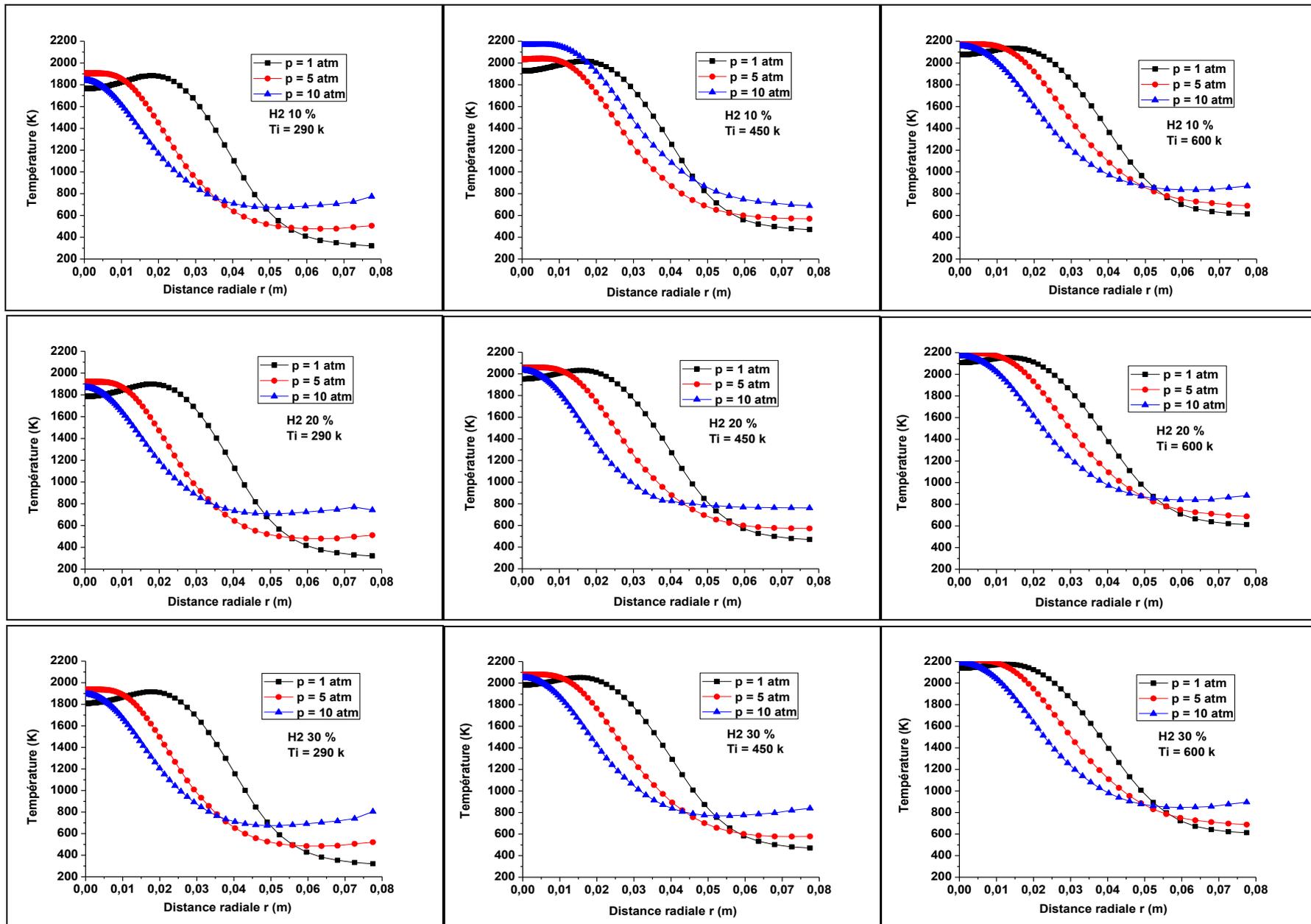


Figure IV.9 : Distribution radiale de la température à 425 mm

L'examen des courbes de la répartition de la fraction de mélange le long de l'axe pour les cas décrits dans le tableau IV.2, (figure IV.10), montre que dans tous les cas :

- L'augmentation de la pression induit une réduction plus rapide de la fraction de mélange, le long de l'axe.
- Pour la même température, l'augmentation de la pression accroît la vitesse de réduction de la fraction de mélange.
- L'augmentation de la température réduit la différence entre les courbes pour des pressions différentes.
- L'augmentation du taux d'hydrogène conduit à une réduction plus rapide de la fraction de mélange.
- L'augmentation du taux d'hydrogène réduit l'écart pour les trois cas de pression objet de cette étude.

En conclusion, l'augmentation de la pression, de la température ou du taux d'hydrogène conduisent à une réduction plus rapide de la fraction de mélange. Cela implique que le carburant est consommé plus rapidement le long de l'axe du brûleur et cela justifie l'élévation rapide de la température dans ce cas et explique la réduction de la taille de la flamme.

La distribution radiale de la fraction de mélange à la distance 150 mm de la section du jet pour les cas dont les caractéristiques sont consignées dans le tableau IV.2 est illustrée par la figure IV.11. L'examen des différentes courbes permet de noter une réduction rapide de la fraction de mélange avec l'augmentation, de la pression et du taux d'hydrogène. L'accroissement de la température d'admission engendre également le même effet (réduction de la fraction de mélange). Par ailleurs, l'écart entre les courbes pour des pressions différentes est également réduit.

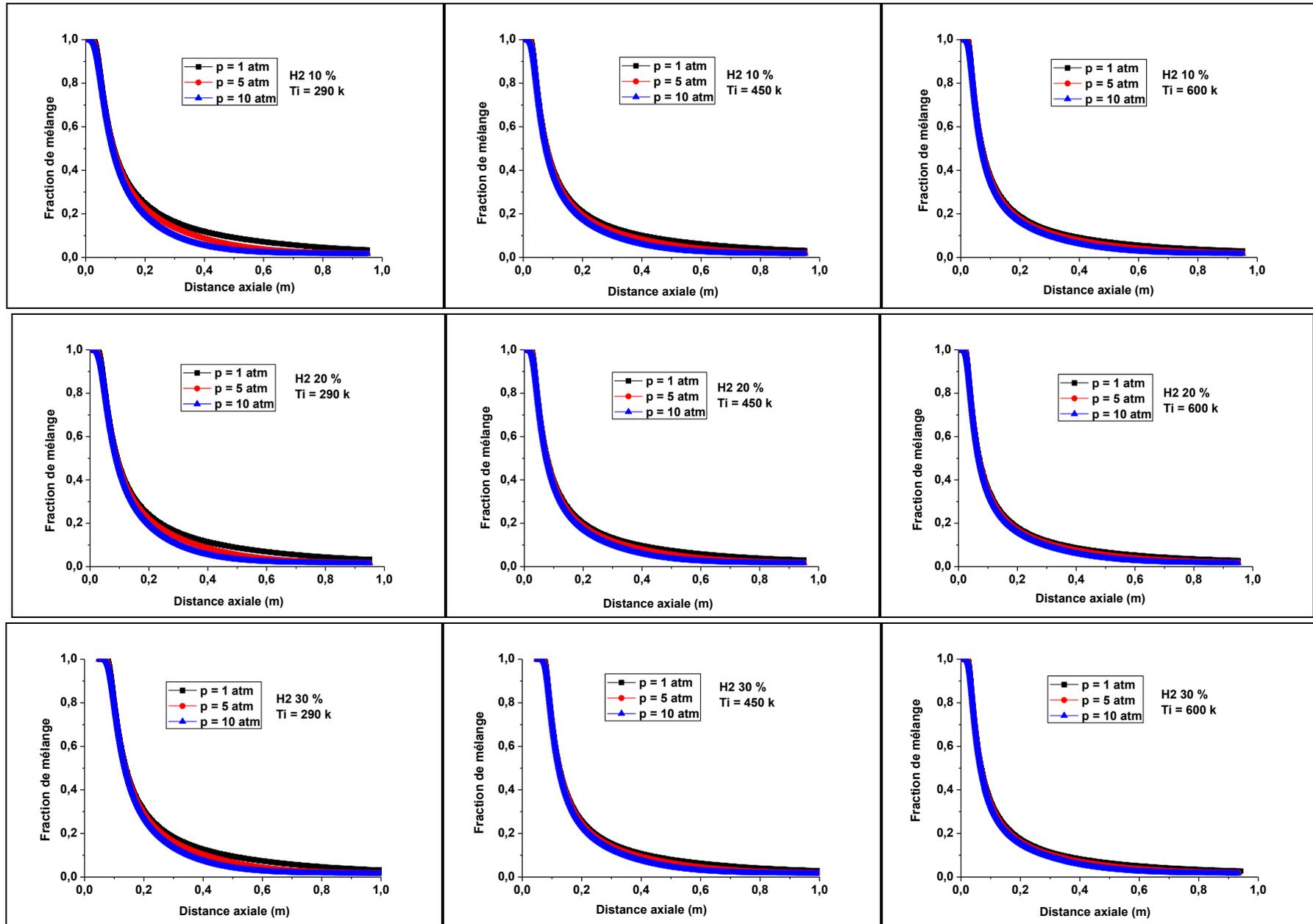


Figure IV.10: Distribution axiale de la fraction de mélange

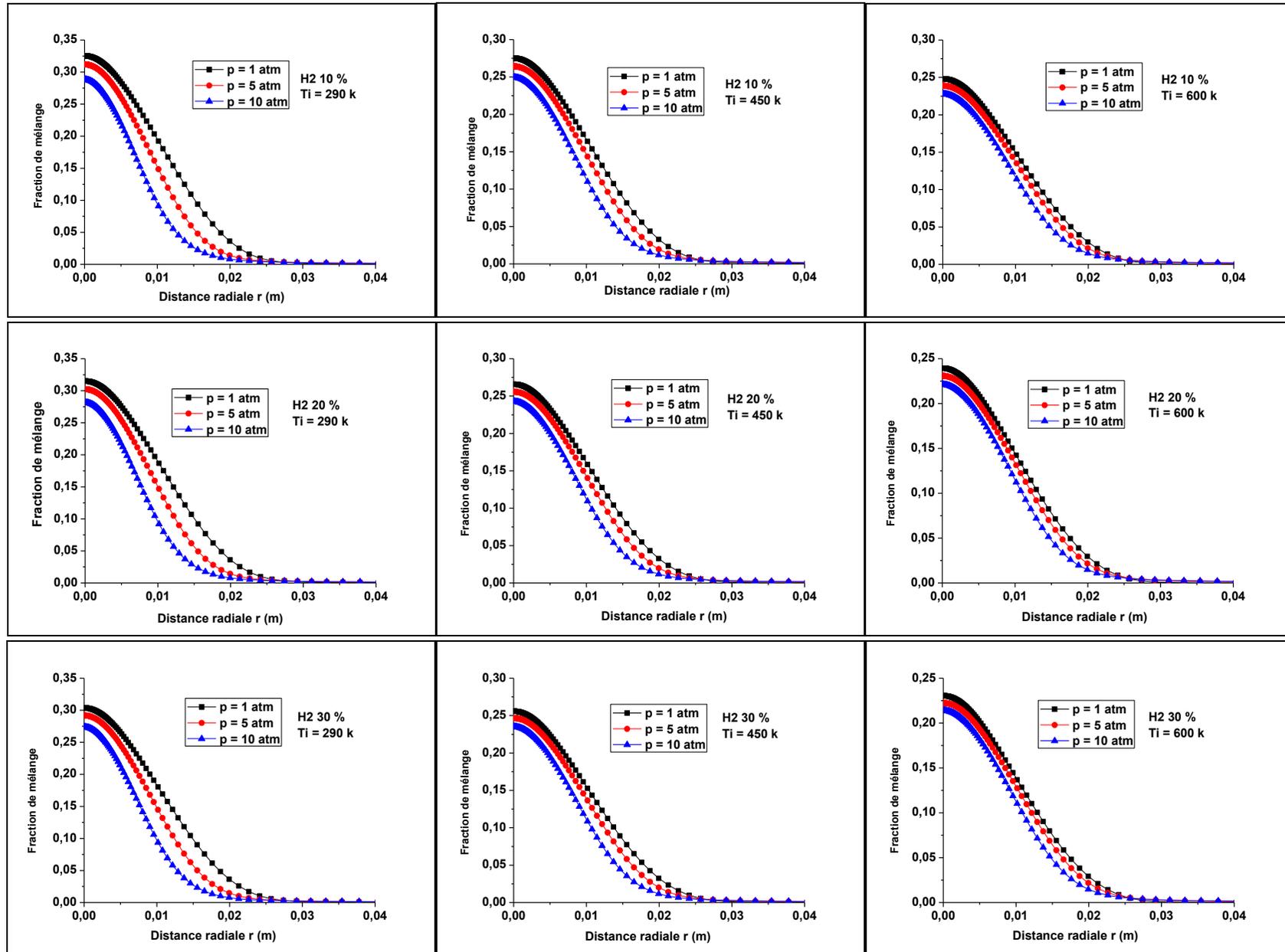


Figure IV.11: Distribution radiale de la fraction de mélange à 150 mm

La distribution radiale de la fraction de mélange à 425 mm de la section de jet pour les cas décrits dans le tableau IV.2 (figure IV.12), met en exergue l'effet de la pression qui paraît plus accentué à cette section. Nous remarquerons ainsi une diminution de la fraction de mélange due à l'augmentation de la pression ; et de la température d'admission.

Il apparaît également qu'une réduction de la fraction de mélange résulte de l'augmentation du taux d'hydrogène néanmoins elle est moins importante avec l'accroissement de la pression ambiante.

On remarque ainsi que l'augmentation de la pression provoque une réduction de la flamme dans les sens axial et radial. Des résultats similaires ont été rapportés pour des flammes prémélangées par Kobayashi et al. [90, 94, 96], Cohé et al. [34] et Griebel et al. [47]. La réduction de la taille de la flamme et celle plus rapide de la fraction de mélange indiquent une consommation plus grande du carburant avec l'augmentation de la pression.

Une accélération de la réaction et donc une consommation plus rapide du combustible résulte de l'augmentation de la température initiale, de la pression et du taux d'hydrogène, ce qui provoque par conséquent une augmentation plus rapide de la température tel qu'observé dans les courbes des figures IV.7, IV.8, IV.9.

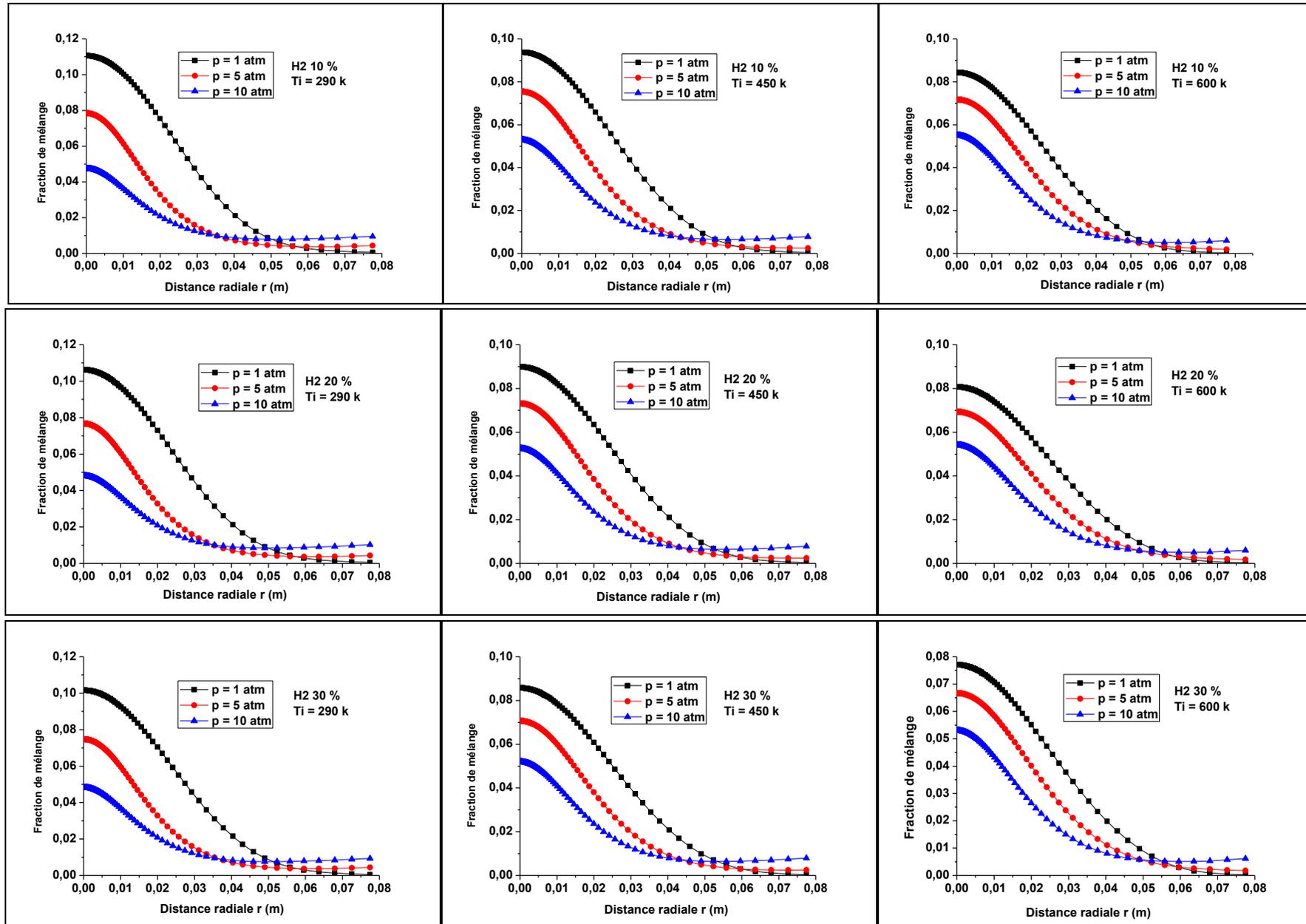


Figure IV.12 : Distribution radiale de la fraction de mélange à 425 mm

### 5.2. Effet de la pression et de la température initiale sur les fractions massiques de CO et de NO

L'effet des trois paramètres, pression, température et taux d'hydrogène sur les répartitions axiale et radiale de deux gaz polluants, le monoxyde de carbone et le monoxyde d'azote, sera examiné dans ce qui suit.

Les répartitions axiales de la fraction massique du monoxyde de carbone pour les cas consignés dans le tableau IV.2, sont représentées par les courbes de la figure IV.13. Nous pouvons remarquer que la hausse de la pression ambiante provoque dans un premier temps une augmentation rapide et importante de la fraction massique du monoxyde de carbone, pour décroître rapidement quand on s'éloigne de la section de jet, cela est d'autant plus accentuée que la température et le taux d'hydrogène augmentent. Ainsi, l'accroissement de la pression qui se traduit également par la réduction de la taille de la flamme, conduit à la réduction de la zone de réaction. D'autre part, le pic de fraction de monoxyde de carbone est d'autant plus accentué que la température d'admission est élevée. La même remarque est à faire pour ce qui est du taux d'hydrogène.

La répartition radiale de la fraction massique du monoxyde de carbone à la distance de 150 mm de la section du jet pour les cas dont les caractéristiques sont données par le tableau IV.2 est illustrée la figure IV.14. Nous pouvons noter que l'augmentation de la pression ambiante induit un accroissement de la fraction massique du monoxyde de carbone quand on s'approche de la ligne de l'axe, qui décroît plus rapidement en s'éloignant de ce dernier. D'autre part, une augmentation sensible de la fraction massique du monoxyde de carbone est observée avec l'élévation de la température d'admission.

Par ailleurs, Il est à remarquer que la hausse du taux d'hydrogène provoque une augmentation de la fraction massique du monoxyde de carbone. Néanmoins cet effet se remarque moins avec l'augmentation de la température d'admission. En effet, l'hydrogène accélère la réaction, il en résulte une augmentation rapide et importante de la fraction massique du monoxyde de carbone (résultant de la combustion du méthane) et de la température. Par ailleurs, l'accroissement de la température d'admission a un effet similaire (accélération de la réaction) ce qui explique la réduction de l'écart par la modification du taux d'hydrogène pour les cas de températures d'admission élevées.

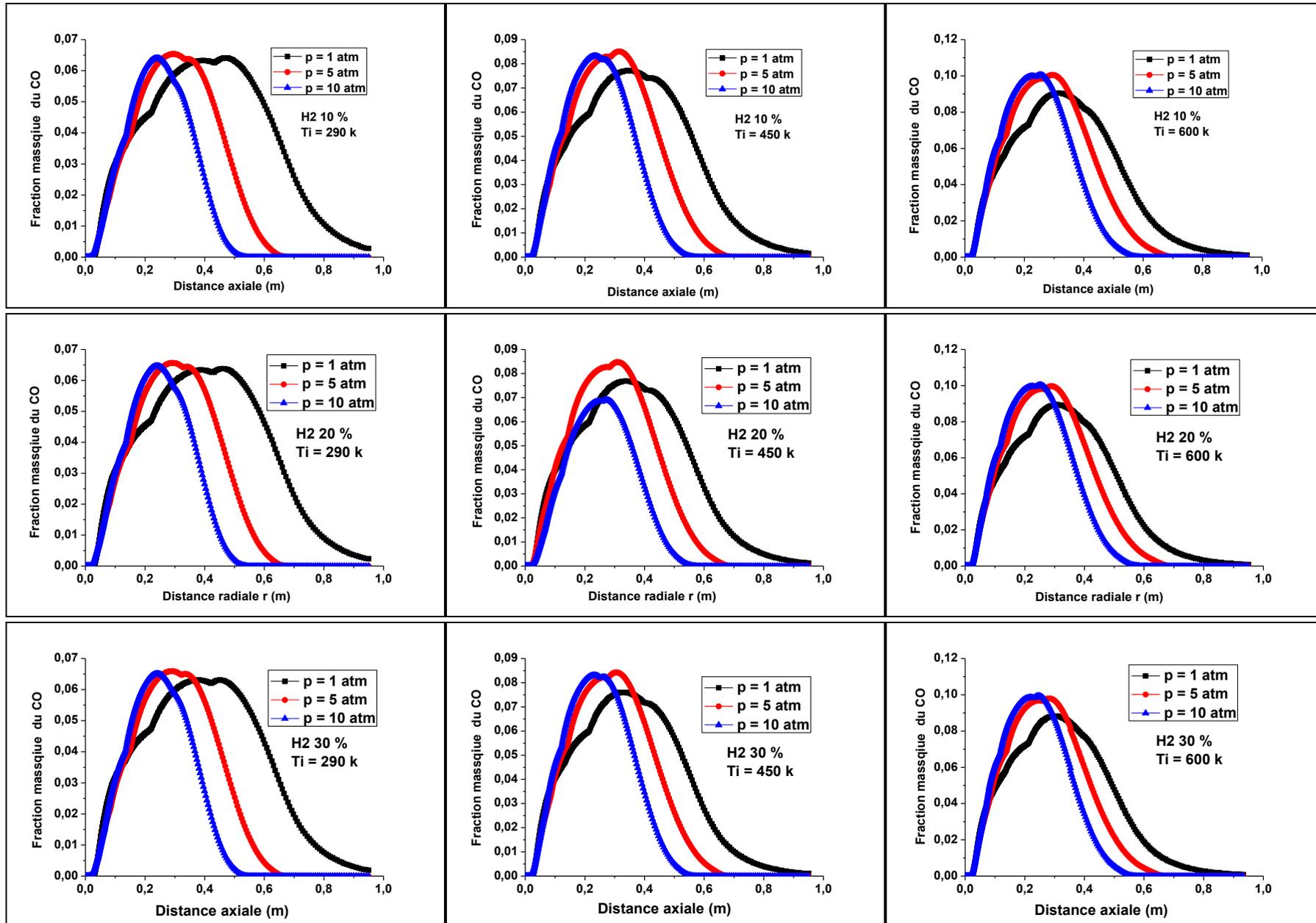


Figure IV.13 : Distribution axiale de la fraction massique de CO

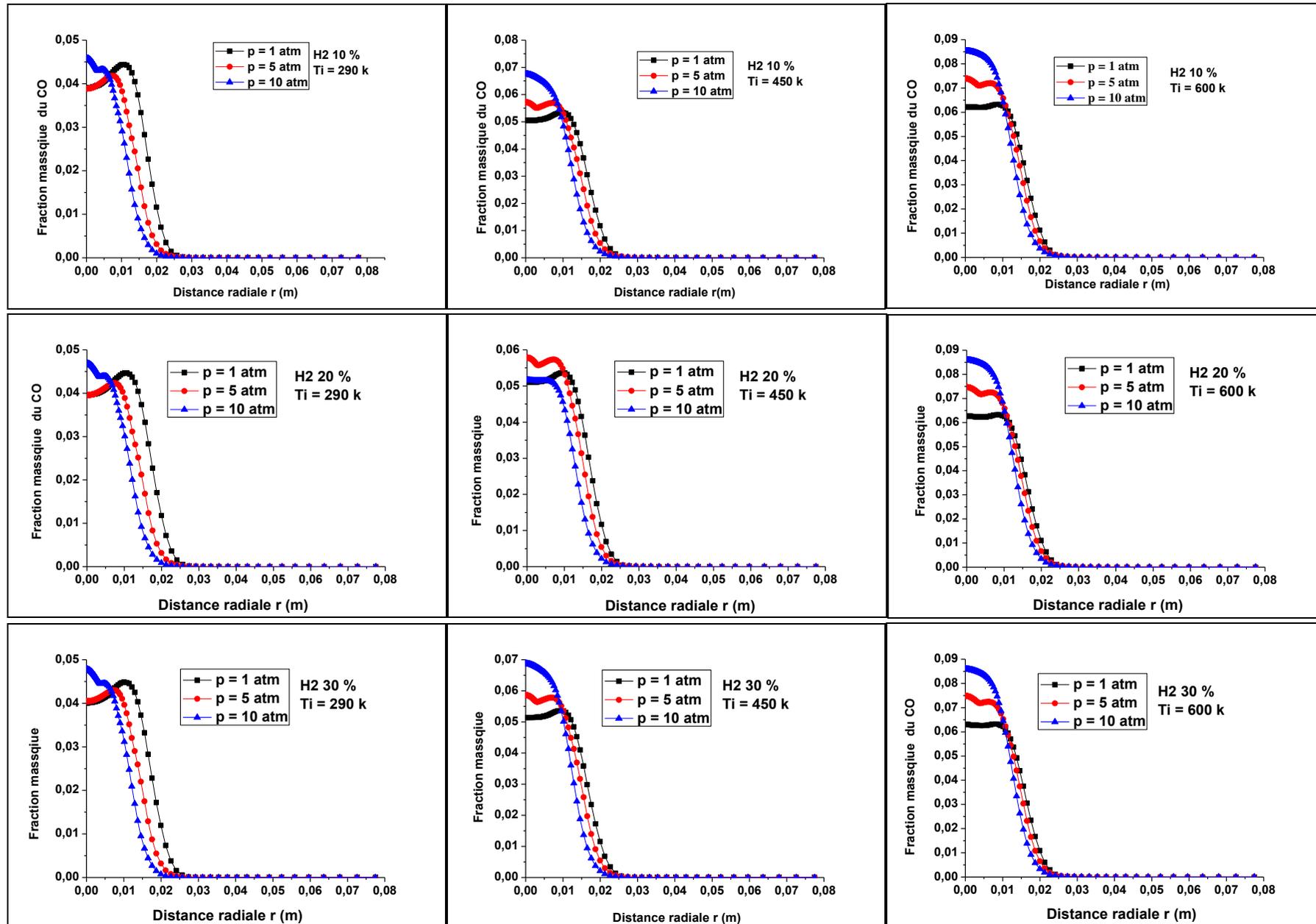


Figure IV.14 : Distribution radiale de la fraction massique de CO à 150 mm.

L'examen des courbes de la figure IV.15 représentant la répartition radiale de la fraction massique du monoxyde de carbone à la distance de 425 mm de la section de jet pour les cas consignés dans le tableau IV.2 montre que, contrairement à la section à 150 mm, l'augmentation de la pression provoque une réduction de la fraction massique du monoxyde de carbone. A cette section la température n'a pas un effet remarquable sur la fraction massique du monoxyde de carbone, alors que l'augmentation du taux d'hydrogène dans le mélange le réduit sensiblement.

Ce changement de comportement pour les deux sections, à 150 mm et à 425 mm, est dû à la modification de la structure de la flamme provoquée par l'élévation de la pression ambiante. En effet, l'augmentation de la pression fait que la réaction se déroule sur une distance plus courte. De ce fait, les radicaux se créent et disparaissent sur une distance plus courte ce qui provoque cette nouvelle configuration, d'une pression à une autre.

Les courbes de la distribution axiale de la fraction massique du monoxyde d'azote pour les cas décrits dans le tableau IV.2, (figure IV.16), mettent en évidence l'effet de la réduction de la zone de réaction. Nous pouvons remarquer que :

- La fraction massique du monoxyde d'azote augmente plus rapidement et décroît plus vite avec l'augmentation de la pression.
- Le pic de la fraction massique du monoxyde d'azote qui augmente légèrement avec la pression est d'autant plus accentué quand la température d'admission est élevée.
- La fraction massique du monoxyde d'azote est d'autant plus importante que la température d'admission est élevée, du fait que la plus grande quantité de monoxyde d'azote produite provient de l'effet thermique.
- L'augmentation du taux d'hydrogène provoque un léger accroissement de la fraction massique du monoxyde d'azote, du fait que l'introduction d'hydrogène augmente la température de combustion

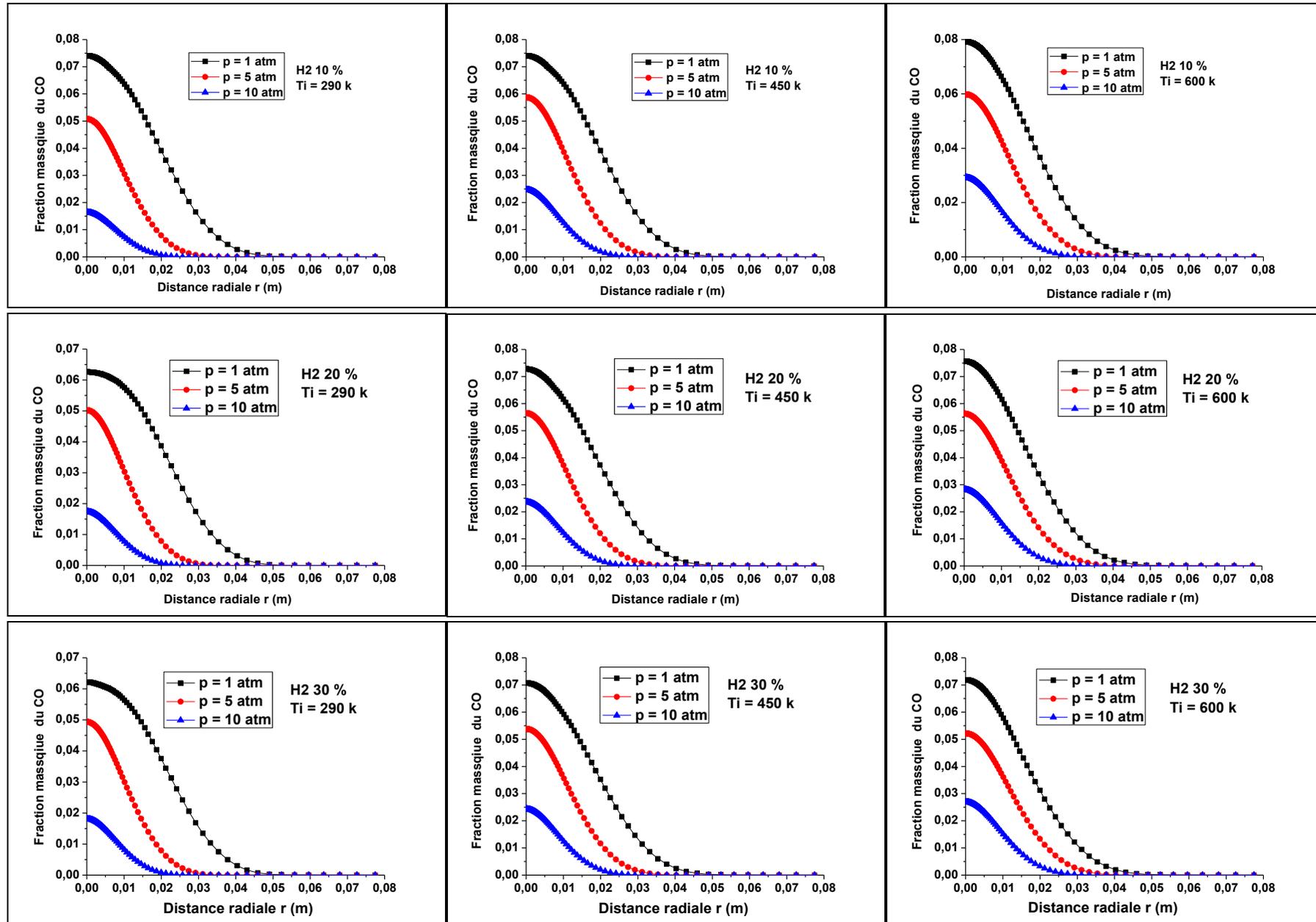


Figure IV.15 : Distribution radiale de la fraction massique de CO à 425 mm.

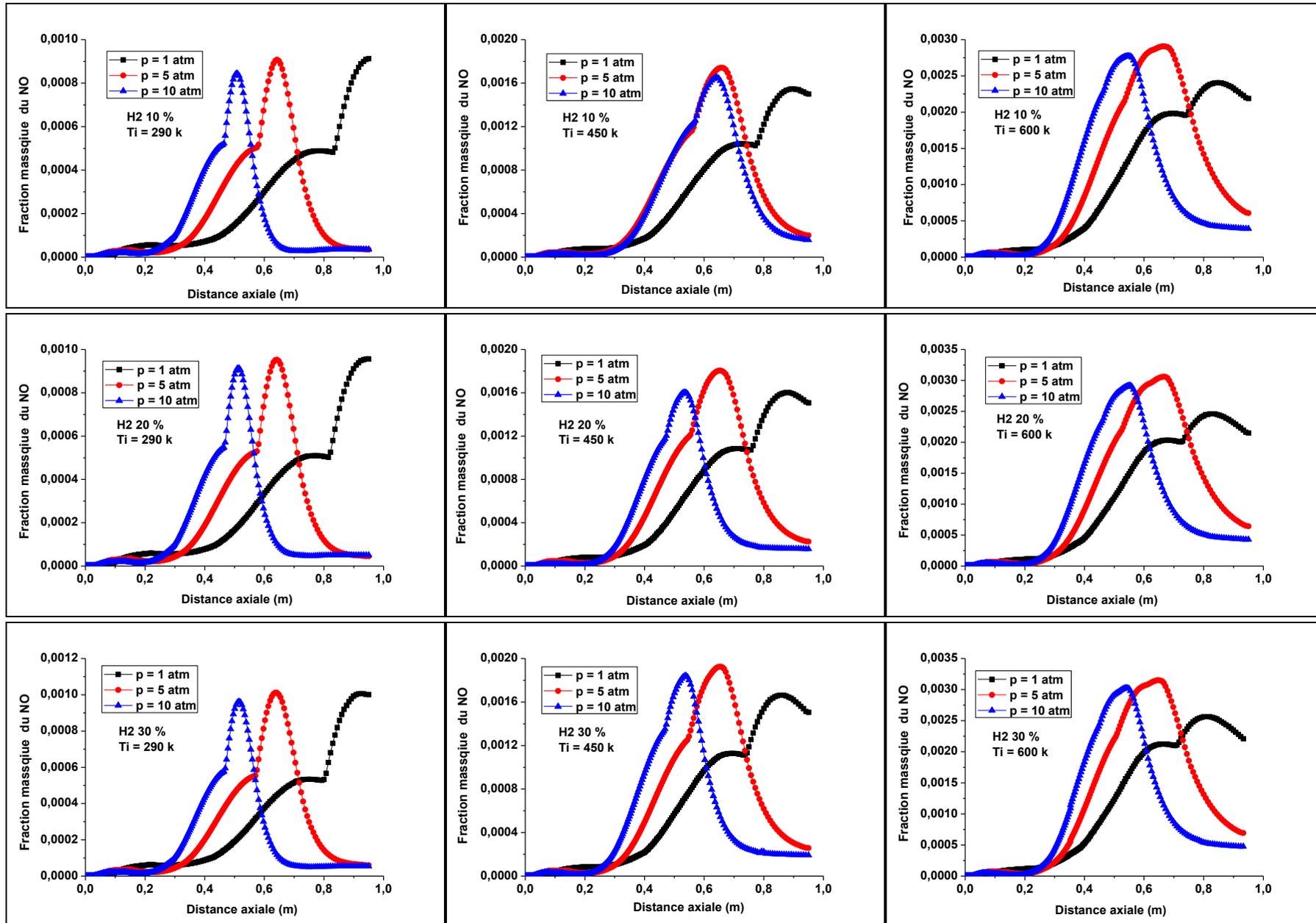


Figure IV.16 : Distribution axiale de la fraction massique du NO.

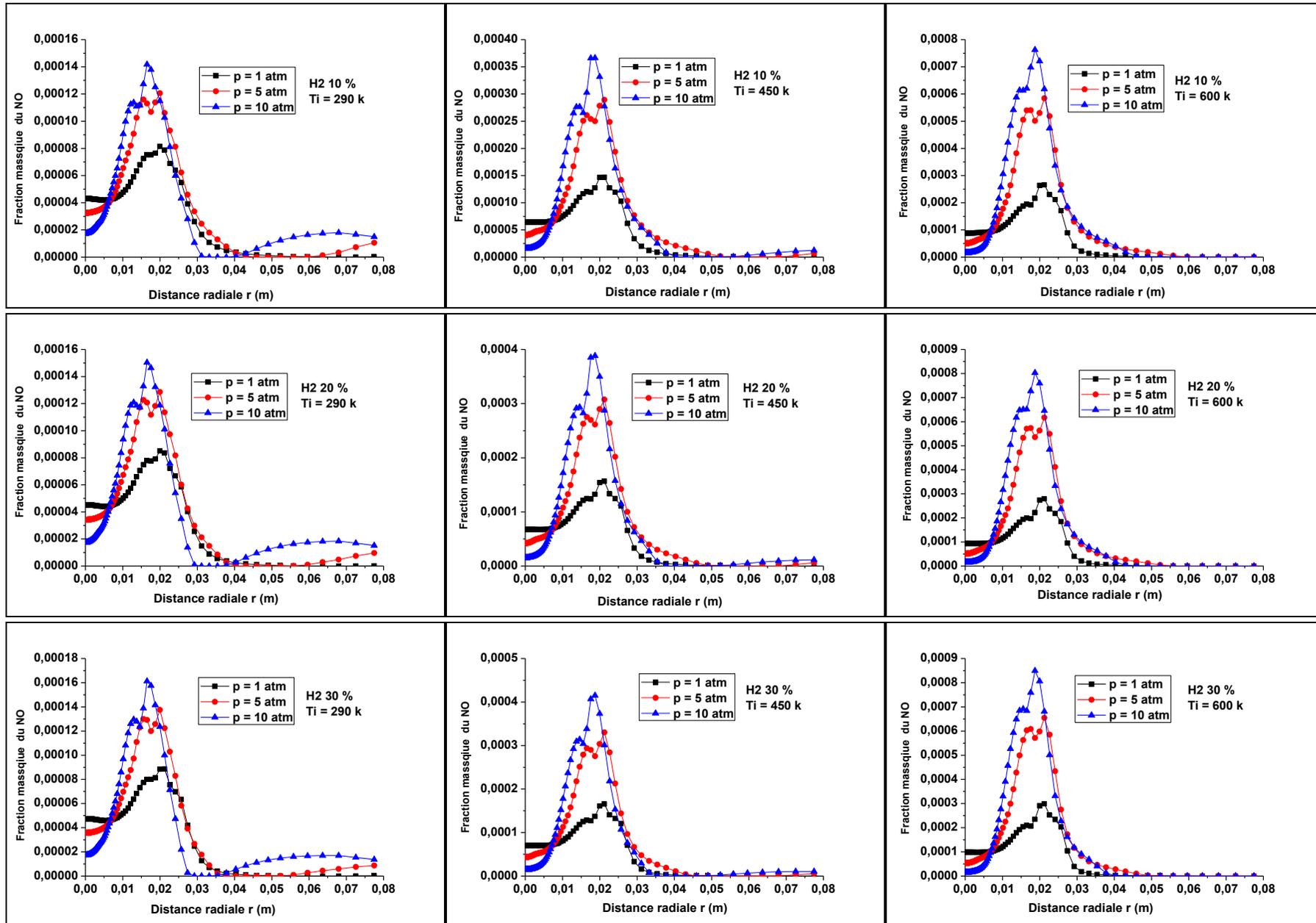


Figure IV.17 : Distribution radiale de la fraction massique du NO à 150 mm.

Les courbes de la figure IV.17, illustrent la distribution radiale de la fraction massique du monoxyde d'azote à la section distante de 150 mm, de la section de jet pour les cas consignés dans le tableau IV.2. Nous pouvons observer que l'accroissement de la pression ambiante ou de la température initiale, ou du taux d'hydrogène, augmente la fraction massique du monoxyde d'azote, mais dans une moindre mesure, pour le dernier cas

Pour la distribution radiale de la fraction massique du monoxyde d'azote à la section distante de 425 mm de la section de jet pour les cas donnés dans le tableau IV.2 (figure IV.18), il apparaît que près de la ligne d'axe, que la fraction massique du monoxyde d'azote est d'autant plus importante que plus la pression ambiante est élevée. Le phénomène inverse est observé loin de la ligne. Cela témoigne d'une part, du rétrécissement de la zone de réaction dans le sens radial avec l'augmentation de la pression ambiante et d'autre part que les réactions sont plus intenses sur une distance plus courte.

La même remarque peut être avancée quant à l'effet de la température ambiante et du taux d'hydrogène (figure IV.18). Ainsi, la fraction massique du monoxyde d'azote est augmentée par l'élévation de la température d'admission (effet thermique), et/ou de celle du taux d'hydrogène, étroitement liée à la température de combustion.

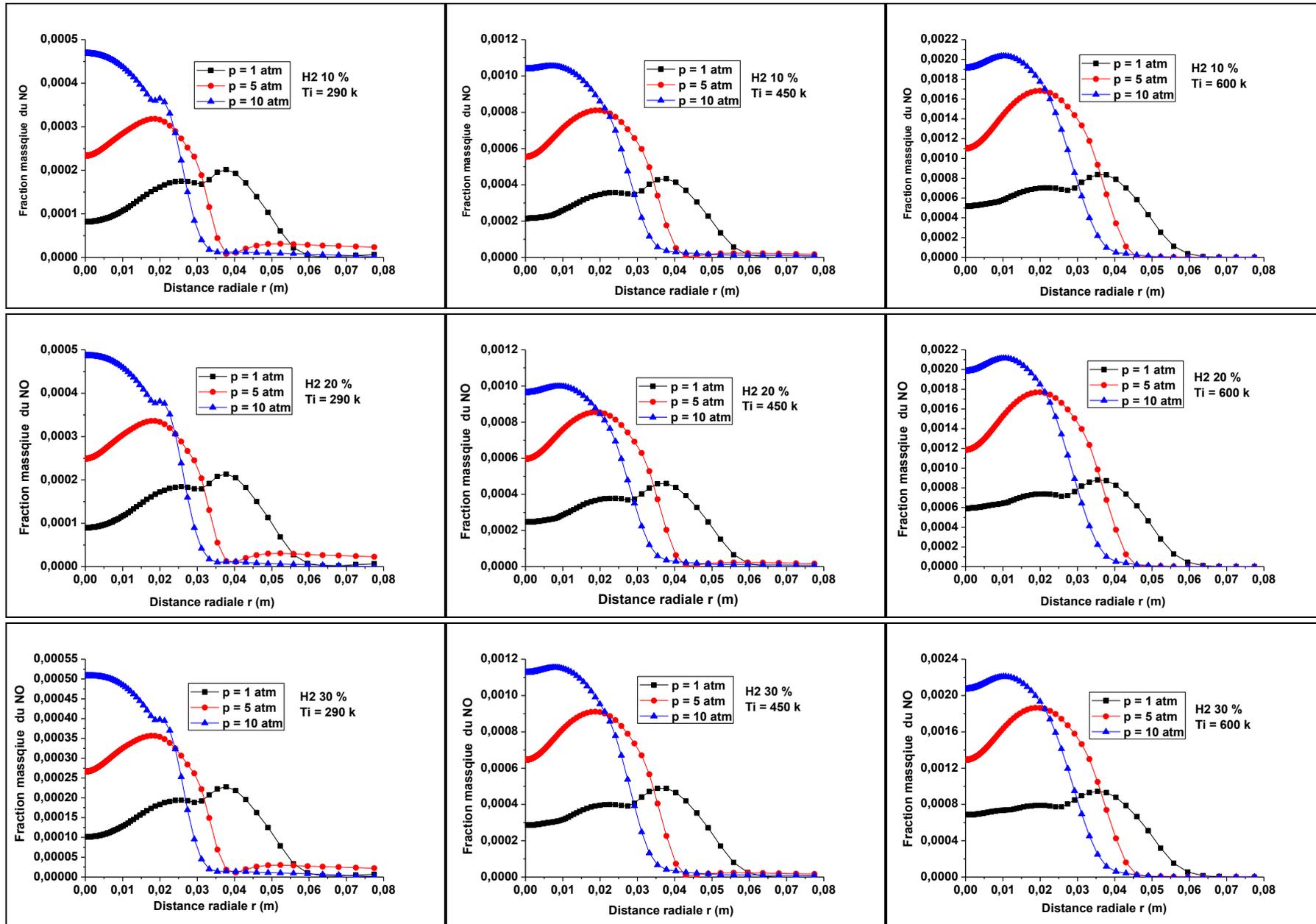


Figure IV.18 : Distribution radiale de la fraction massique du NO à 425 mm.

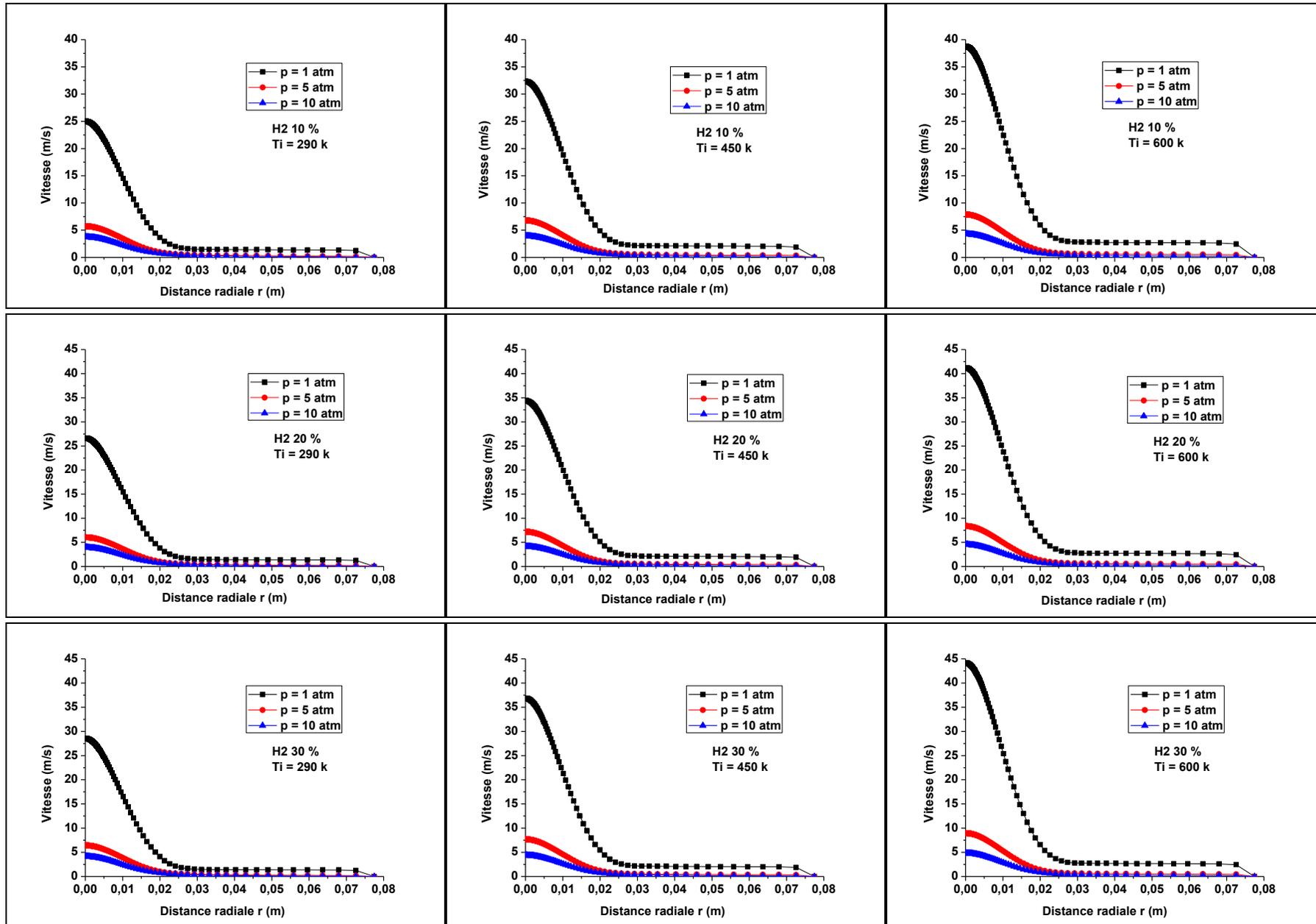


Figure IV.19 : Distribution radiale de la vitesse à 150 mm

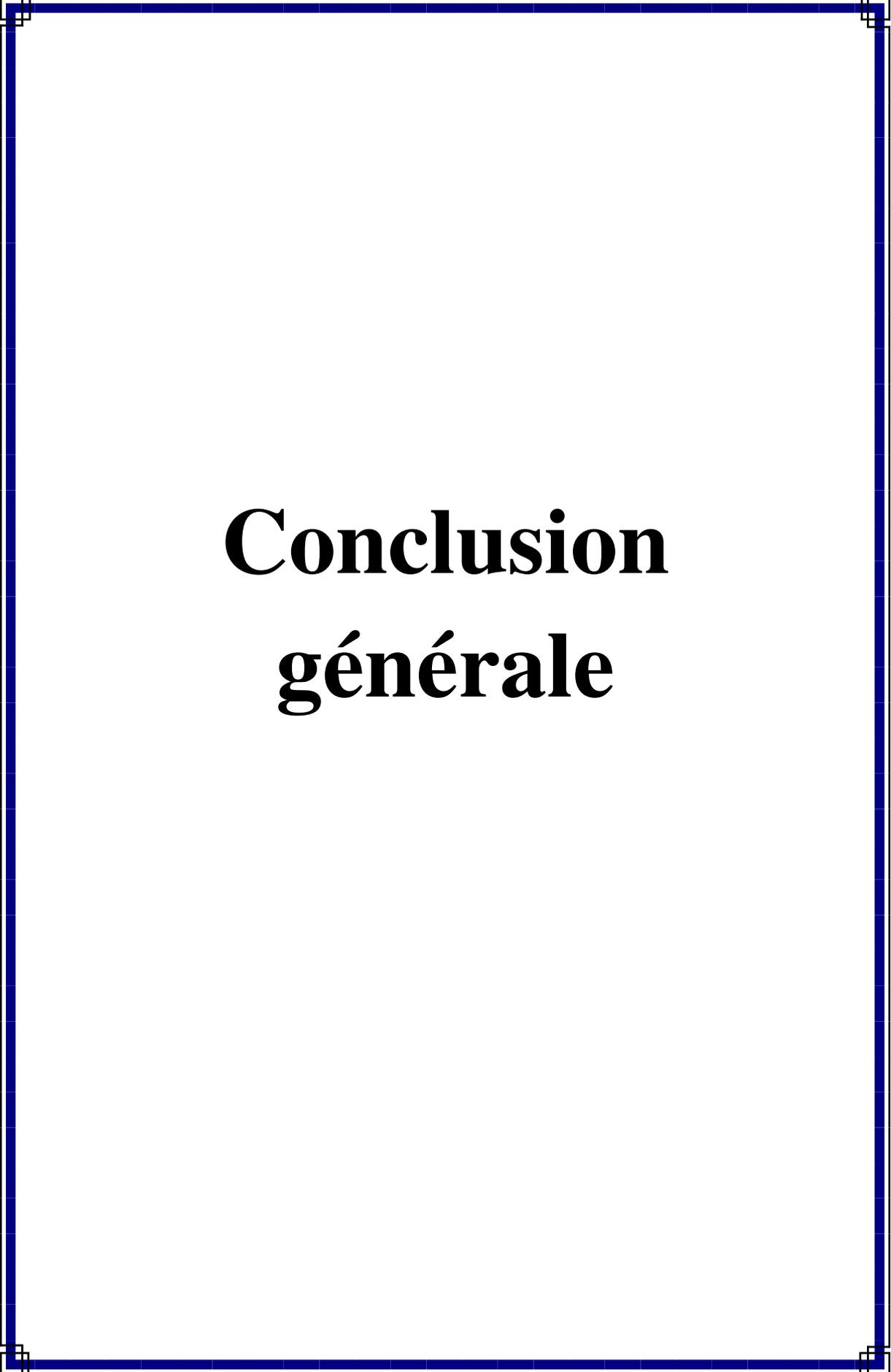
La distribution radiale de la vitesse d'écoulement des gaz à l'intérieur du brûleur, à la distance de 150 mm de la section du jet, pour les cas décrits dans le tableau IV.2 est reportée sur la figure IV.19.

Il est aisé de remarquer une réduction de la vitesse d'écoulement des gaz avec l'augmentation de la pression ambiante. Pour une même pression et un même débit massique le débit volumique diminue d'autant plus que la pression augmente (par effet de compression), et par conséquent la vitesse d'écoulement diminue.

La vitesse d'écoulement évolue dans le même sens que la température d'admission. En effet, l'augmentation de la température a tendance à dilater les gaz, il en résulte que pour un même débit massique, le débit volumique augmente et donc une plus grande vitesse d'écoulement.

Ainsi et tel qu'il a été observé dans le chapitre précédent, l'augmentation du taux d'hydrogène accroît la vitesse d'écoulement pour un même débit massique. L'introduction de l'hydrogène, de densité plus faible que celle du méthane, réduira la densité du mélange. Cela aura pour conséquence que pour un même débit massique, le débit volumique augmente et la vitesse (du mélange) devient plus importante.

La réduction de la vitesse par l'augmentation de la pression ambiante explique également en partie le rétrécissement de la taille de la flamme et de la zone de réaction. Ce phénomène est rapporté par certains auteurs [93, 96-103]. Par la réduction de la vitesse d'écoulement des gaz et pour une même vitesse de propagation de la flamme ou une variation relativement faible, les réactifs sont consommés sur une distance plus faible, d'où le rétrécissement de la zone de réaction et par conséquent de la flamme. Ce rétrécissement se répercute également sur les répartitions axiale et radiale de la fraction massique du monoxyde de carbone et du monoxyde d'azote.



# **Conclusion générale**

Dans ce travail il a été question, dans une première partie, de l'effet de l'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène. Dans une deuxième partie, l'effet combiné du taux d'hydrogène, de la pression ambiante et de la température d'admission sur une flamme de diffusion turbulente du mélange méthane hydrogène avec une flamme pilote est examiné.

La recherche bibliographique menée dans le cadre de ce travail a révélé qu'un nombre important de travaux traitent de l'enrichissement des hydrocarbures à l'hydrogène.

De nombreux auteurs ont montré non seulement la possibilité de l'utilisation du mélange (méthane hydrogène), dans les systèmes de combustion existants mais que l'introduction de l'hydrogène, jusqu'à un certain taux, ne nécessite pas d'intervention sur le réseau de distribution de gaz, existant. Il ressort de cette synthèse bibliographique, la nécessité de se préparer à cette transition énergétique par l'amélioration des systèmes de combustion.

Avant d'entamer l'étude de l'effet de l'hydrogène sur la flamme, les performances de trois modèles de turbulence, le k- $\epsilon$  standard, le modèle RSM et le k- $\epsilon$  modifié ainsi que celles de deux schémas cinétique détaillé le GRI 2.11 et le GRI 3 ont été comparées. Pour ce faire nous avons couplé ces modèles et comparé leurs résultats à ceux obtenus par Bergman [85] dans une étude expérimentale. Il en ressort que le modèle de turbulence k- $\epsilon$  modifié est celui qui donne les meilleurs résultats et paraît le mieux adapté à la géométrie utilisée. Les deux schémas cinétiques donnent des résultats très proches mais le GRI 2.11, compte moins de réactions et d'espèces en réaction, il s'exécute donc plus rapidement et nécessite moins de ressources.

L'étude de l'effet de l'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulente a été menée en adoptant la géométrie utilisée par Bergman [85]. Le taux volumique d'hydrogène dans le méthane est varié de 0% à 50% avec un pas de 10%. Pour chaque mélange, les iso-contours de température, les distributions axiale et radiale de la température de la fraction massique du méthane, de la fraction massique du OH, du monoxyde et du dioxyde de carbone, du monoxyde d'azote ainsi que la distribution radiale de la vitesse d'écoulement, la puissance pour chaque flamme et les émissions de monoxyde d'azote et du monoxyde de carbone pour chaque flamme, ont été examinés.

Les résultats obtenus ont conduit aux observations suivantes:

- Un rétrécissement de la flamme
- Une réduction des expansions radiale et axiale de la flamme
- Un rétrécissement de la zone de réaction et une consommation plus rapide du combustible
- Une baisse de la fraction massique de CO et de CO<sub>2</sub>

- Une hausse de la fraction massique du monoxyde d'azote
- Une augmentation de la vitesse du jet de carburant mais une réduction plus rapide de la vitesse loin de la section de jet
- Une baisse des émissions de monoxyde et de dioxyde de carbone
- Une légère réduction de la puissance de la flamme
- Un accroissement de l'émission de monoxyde d'azote

Il apparaît également que l'introduction de l'hydrogène réduit la densité du mélange et donc le débit massique à l'entrée de la chambre de combustion et dans une moindre mesure la puissance de la flamme.

Notre intérêt a par la suite porté sur l'effet combiné de la température et de la pression ainsi que le taux d'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulente dotée d'une flamme pilote. La configuration choisie est celle utilisée par Brooks et al. [44], dans une étude expérimentale qui traite de l'effet de la pression sur la combustion du méthane. La température d'admission a été variée de 290 K à 600 K, et la pression ambiante de 0.1 Mpa à 1 Mpa, pour trois mélanges de méthane et d'hydrogène et pour un taux d'hydrogène de 10 à 30 %.

A l'issue de cette étude, nous avons remarqué que l'augmentation de la pression ambiante réduit la taille de la flamme et ses expansions axiale et radiale, par une consommation plus rapide du combustible. Nous avons également noté une augmentation de la fraction massique du monoxyde d'azote ainsi qu'une hausse sensible du pic de la fraction massique du monoxyde de carbone qui, par la suite, décroît plus rapidement le long de l'axe de la flamme.

Il apparaît ainsi que l'augmentation de la température d'admission conduit à:

- Une augmentation de la température de combustion.
- Un accroissement de la fraction massique du NO produit.
- Une consommation plus rapide du carburant

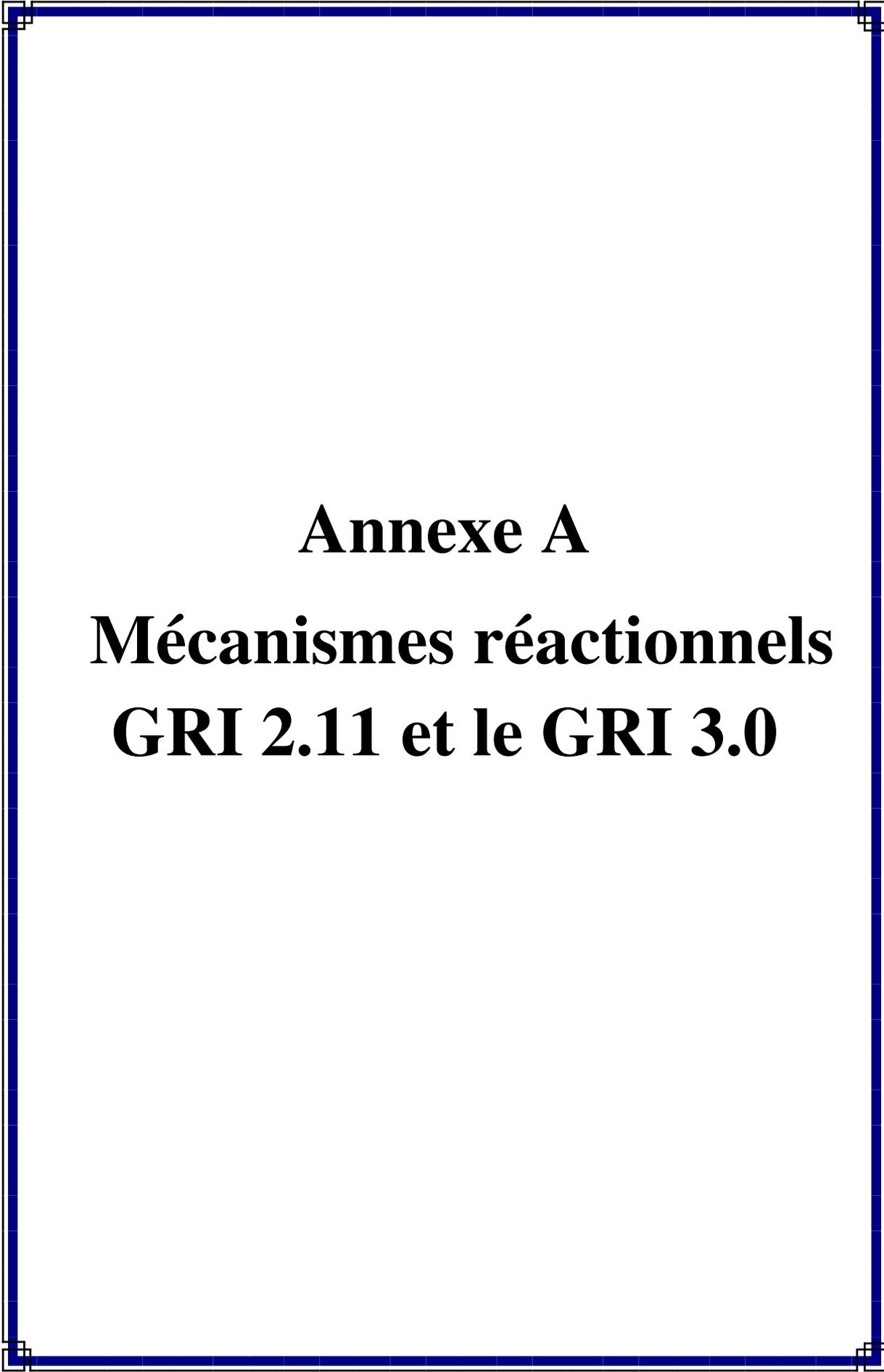
Concernant l'effet du taux d'hydrogène il est similaire à celui sur une flamme de diffusion turbulente (chapitre 3):

- Rétrécissement de la flamme
- Consommation plus rapide du carburant
- Réduction de l'expansion radiale et axiale de la flamme
- Diminution de la fraction massique de CO
- Augmentation de la fraction massique du monoxyde d'azote

Il est à noter que l'augmentation de la pression ambiante réduit faiblement l'effet de l'hydrogène sur la structure de la flamme.

Par ailleurs, l'introduction de l'hydrogène dans le méthane présente un avantage certain pour ce qui est de la réduction des émissions de monoxyde et de dioxyde de carbone sans avoir d'impact important sur les performances des brûleurs étudiés.

L'augmentation de la production de monoxyde d'azote par l'introduction de l'hydrogène pourrait être résolue par l'introduction de diluant dans le co-courant d'air. En effet l'ajout d'un diluant tel que le CO<sub>2</sub>, avec l'air ( le CO<sub>2</sub> pourrait provenir d'une recirculation de gaz de combustion comme dans le cas de la vanne EGR pour les moteur à combustion interne) réduirait la quantité d'air et de ce fait la quantité d'azote, ce qui aurait pour conséquence la diminution de la production de monoxyde d'azote.



**Annexe A**

**Mécanismes réactionnels**

**GRI 2.11 et le GRI 3.0**

## Annexe A

### Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

Les deux mécanismes réactionnels, le GRI 2.11 et le GRI 3.0, sont des schémas cinétiques détaillés développés par des équipes de l'université de Berkeley [104, 105].

Ils sont disponibles dans un format adapté au logiciel Chemkin sur un site internet réservé à cet effet.

#### 1. GRI 2.11

! GRI-Mech Version 2.11 11/3/95 1st release 9/6/95 CHEMKIN-II format

! corrected sign of E for NH<sub>3</sub> + H, NH<sub>3</sub> + OH

! See README21 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;

! WorldWideWeb home page through <http://www.gri.org> , under 'Basic

! Research', for additional information, contacts, and disclaimer

ELEMENTS

O H C N AR

END

SPECIES

H2 H O O2 OH H2O HO2 H2O2

C CH CH2 CH2(S) CH3 CH4 CO CO2

HCO CH2O CH2OH CH3O CH3OH C2H C2H2 C2H3

C2H4 C2H5 C2H6 HCCO CH2CO HCCOH N NH

NH2 NH3 NNH NO NO2 N2O HNO CN

HCN H2CN HCNN HCNO HOCN HNCO NCO N2

AR

END

!THERMO

! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file

!END

REACTIONS

2O+M<=>O2+M 1.200E+17 -1.000 .00

H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/

O+H+M<=>OH+M 5.000E+17 -1.000 .00

H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/

O+H2<=>H+OH 5.000E+04 2.670 6290.00

O+HO2<=>OH+O2 2.000E+13 .000 .00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

O+H2O2<=>OH+HO2	9.630E+06	2.000	4000.00
O+CH<=>H+CO	5.700E+13	.000	.00
O+CH2<=>H+HCO	8.000E+13	.000	.00
O+CH2(S)<=>H2+CO	1.500E+13	.000	.00
O+CH2(S)<=>H+HCO	1.500E+13	.000	.00
O+CH3<=>H+CH2O	8.430E+13	.000	.00
O+CH4<=>OH+CH3	1.020E+09	1.500	8600.00
O+CO+M<=>CO2+M	6.020E+14	.000	3000.00
H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/ AR/ .50/			
O+HCO<=>OH+CO	3.000E+13	.000	.00
O+HCO<=>H+CO2	3.000E+13	.000	.00
O+CH2O<=>OH+HCO	3.900E+13	.000	3540.00
O+CH2OH<=>OH+CH2O	1.000E+13	.000	.00
O+CH3O<=>OH+CH2O	1.000E+13	.000	.00
O+CH3OH<=>OH+CH2OH	3.880E+05	2.500	3100.00
O+CH3OH<=>OH+CH3O	1.300E+05	2.500	5000.00
O+C2H<=>CH+CO	5.000E+13	.000	.00
O+C2H2<=>H+HCCO	1.020E+07	2.000	1900.00
O+C2H2<=>OH+C2H	4.600E+19	-1.410	28950.00
O+C2H2<=>CO+CH2	1.020E+07	2.000	1900.00
O+C2H3<=>H+CH2CO	3.000E+13	.000	.00
O+C2H4<=>CH3+HCO	1.920E+07	1.830	220.00
O+C2H5<=>CH3+CH2O	1.320E+14	.000	.00
O+C2H6<=>OH+C2H5	8.980E+07	1.920	5690.00
O+HCCO<=>H+2CO	1.000E+14	.000	.00
O+CH2CO<=>OH+HCCO	1.000E+13	.000	8000.00
O+CH2CO<=>CH2+CO2	1.750E+12	.000	1350.00
O2+CO<=>O+CO2	2.500E+12	.000	47800.00
O2+CH2O<=>HO2+HCO	1.000E+14	.000	40000.00
H+O2+M<=>HO2+M	2.800E+18	-.860	.00
O2/ .00/ H2O/ .00/ CO/ .75/ CO2/1.50/ C2H6/1.50/ N2/ .00/ AR/ .00/			
H+2O2<=>HO2+O2	3.000E+20	-1.720	.00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O	9.380E+18	-.760	.00
H+O2+N2<=>HO2+N2	3.750E+20	-1.720	.00
H+O2+AR<=>HO2+AR	7.000E+17	-.800	.00
H+O2<=>O+OH	8.300E+13	.000	14413.00
2H+M<=>H2+M	1.000E+18	-1.000	.00
H2/ .00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO2/ .00/ C2H6/3.00/ AR/ .63/			
2H+H2<=>2H2	9.000E+16	-.600	.00
2H+H2O<=>H2+H2O	6.000E+19	-1.250	.00
2H+CO2<=>H2+CO2	5.500E+20	-2.000	.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

H+OH+M<=>H2O+M	2.200E+22	-2.000	.00
H2/ .73/ H2O/3.65/ CH4/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .38/			
H+HO2<=>O+H2O	3.970E+12	.000	671.00
H+HO2<=>O2+H2	2.800E+13	.000	1068.00
H+HO2<=>2OH	1.340E+14	.000	635.00
H+H2O2<=>HO2+H2	1.210E+07	2.000	5200.00
H+H2O2<=>OH+H2O	1.000E+13	.000	3600.00
H+CH<=>C+H2	1.100E+14	.000	.00
H+CH2(+M)<=>CH3(+M)	2.500E+16	-.800	.00
LOW / 3.200E+27 -3.140 1230.00/			
TROE/ .6800 78.00 1995.00 5590.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH2(S)<=>CH+H2	3.000E+13	.000	.00
H+CH3(+M)<=>CH4(+M)	1.270E+16	-.630	383.00
LOW / 2.477E+33 -4.760 2440.00/			
TROE/ .7830 74.00 2941.00 6964.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH4<=>CH3+H2	6.600E+08	1.620	10840.00
H+HCO(+M)<=>CH2O(+M)	1.090E+12	.480	-260.00
LOW / 1.350E+24 -2.570 1425.00/			
TROE/ .7824 271.00 2755.00 6570.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+HCO<=>H2+CO	7.340E+13	.000	.00
H+CH2O(+M)<=>CH2OH(+M)	5.400E+11	.454	3600.00
LOW / 1.270E+32 -4.820 6530.00/			
TROE/ .7187 103.00 1291.00 4160.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M)	5.400E+11	.454	2600.00
LOW / 2.200E+30 -4.800 5560.00/			
TROE/ .7580 94.00 1555.00 4200.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2O<=>HCO+H2	2.300E+10	1.050	3275.00
H+CH2OH(+M)<=>CH3OH(+M)	1.800E+13	.000	.00
LOW / 3.000E+31 -4.800 3300.00/			
TROE/ .7679 338.00 1812.00 5081.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
H+CH2OH<=>H2+CH2O	2.000E+13	.000	.00
H+CH2OH<=>OH+CH3	1.200E+13	.000	.00
H+CH2OH<=>CH2(S)+H2O	6.000E+12	.000	.00
H+CH3O(+M)<=>CH3OH(+M)	5.000E+13	.000	.00
LOW / 8.600E+28 -4.000 3025.00/			

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

TROE/ .8902 144.00 2838.00 45569.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/  
H+CH3O<=>H+CH2OH 3.400E+06 1.600 .00  
H+CH3O<=>H2+CH2O 2.000E+13 .000 .00  
H+CH3O<=>OH+CH3 3.200E+13 .000 .00  
H+CH3O<=>CH2(S)+H2O 1.600E+13 .000 .00  
H+CH3OH<=>CH2OH+H2 1.700E+07 2.100 4870.00  
H+CH3OH<=>CH3O+H2 4.200E+06 2.100 4870.00  
H+C2H(+M)<=>C2H2(+M) 1.000E+17 -1.000 .00  
LOW / 3.750E+33 -4.800 1900.00/  
TROE/ .6464 132.00 1315.00 5566.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H2(+M)<=>C2H3(+M) 5.600E+12 .000 2400.00  
LOW / 3.800E+40 -7.270 7220.00/  
TROE/ .7507 98.50 1302.00 4167.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H3(+M)<=>C2H4(+M) 6.080E+12 .270 280.00  
LOW / 1.400E+30 -3.860 3320.00/  
TROE/ .7820 207.50 2663.00 6095.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H3<=>H2+C2H2 3.000E+13 .000 .00  
H+C2H4(+M)<=>C2H5(+M) 1.080E+12 .454 1820.00  
LOW / 1.200E+42 -7.620 6970.00/  
TROE/ .9753 210.00 984.00 4374.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H4<=>C2H3+H2 1.325E+06 2.530 12240.00  
H+C2H5(+M)<=>C2H6(+M) 5.210E+17 -.990 1580.00  
LOW / 1.990E+41 -7.080 6685.00/  
TROE/ .8422 125.00 2219.00 6882.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H5<=>H2+C2H4 2.000E+12 .000 .00  
H+C2H6<=>C2H5+H2 1.150E+08 1.900 7530.00  
H+HCCO<=>CH2(S)+CO 1.000E+14 .000 .00  
H+CH2CO<=>HCCO+H2 5.000E+13 .000 8000.00  
H+CH2CO<=>CH3+CO 1.130E+13 .000 3428.00  
H+HCCOH<=>H+CH2CO 1.000E+13 .000 .00  
H2+CO(+M)<=>CH2O(+M) 4.300E+07 1.500 79600.00  
LOW / 5.070E+27 -3.420 84350.00/  
TROE/ .9320 197.00 1540.00 10300.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
OH+H2<=>H+H2O 2.160E+08 1.510 3430.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

2OH(+M)<=>H2O2(+M)	7.400E+13	-.370	.00
LOW / 2.300E+18	-.900	-1700.00/	
TROE/ .7346	94.00	1756.00	5182.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2OH<=>O+H2O	3.570E+04	2.400	-2110.00
OH+HO2<=>O2+H2O	2.900E+13	.000	-500.00
OH+H2O2<=>HO2+H2O	1.750E+12	.000	320.00
DUPLICATE			
OH+H2O2<=>HO2+H2O	5.800E+14	.000	9560.00
DUPLICATE			
OH+C<=>H+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH<=>H+HCO	3.000E+13	.000	.00
OH+CH2<=>H+CH2O	2.000E+13	.000	.00
OH+CH2<=>CH+H2O	1.130E+07	2.000	3000.00
OH+CH2(S)<=>H+CH2O	3.000E+13	.000	.00
OH+CH3(+M)<=>CH3OH(+M)	6.300E+13	.000	.00
LOW / 2.700E+38	-6.300	3100.00/	
TROE/ .2105	83.50	5398.00	8370.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
OH+CH3<=>CH2+H2O	5.600E+07	1.600	5420.00
OH+CH3<=>CH2(S)+H2O	2.501E+13	.000	.00
OH+CH4<=>CH3+H2O	1.000E+08	1.600	3120.00
OH+CO<=>H+CO2	4.760E+07	1.228	70.00
OH+HCO<=>H2O+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH2O<=>HCO+H2O	3.430E+09	1.180	-447.00
OH+CH2OH<=>H2O+CH2O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH3O<=>H2O+CH2O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH3OH<=>CH2OH+H2O	1.440E+06	2.000	-840.00
OH+CH3OH<=>CH3O+H2O	6.300E+06	2.000	1500.00
OH+C2H<=>H+HCCO	2.000E+13	.000	.00
OH+C2H2<=>H+CH2CO	2.180E-04	4.500	-1000.00
OH+C2H2<=>H+HCCOH	5.040E+05	2.300	13500.00
OH+C2H2<=>C2H+H2O	3.370E+07	2.000	14000.00
OH+C2H2<=>CH3+CO	4.830E-04	4.000	-2000.00
OH+C2H3<=>H2O+C2H2	5.000E+12	.000	.00
OH+C2H4<=>C2H3+H2O	3.600E+06	2.000	2500.00
OH+C2H6<=>C2H5+H2O	3.540E+06	2.120	870.00
OH+CH2CO<=>HCCO+H2O	7.500E+12	.000	2000.00
2HO2<=>O2+H2O2	1.300E+11	.000	-1630.00
DUPLICATE			
2HO2<=>O2+H2O2	4.200E+14	.000	12000.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

DUPLICATE

HO2+CH2<=>OH+CH2O	2.000E+13	.000	.00
HO2+CH3<=>O2+CH4	1.000E+12	.000	.00
HO2+CH3<=>OH+CH3O	2.000E+13	.000	.00
HO2+CO<=>OH+CO2	1.500E+14	.000	23600.00
HO2+CH2O<=>HCO+H2O2	1.000E+12	.000	8000.00
C+O2<=>O+CO	5.800E+13	.000	576.00
C+CH2<=>H+C2H	5.000E+13	.000	.00
C+CH3<=>H+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH+O2<=>O+HCO	3.300E+13	.000	.00
CH+H2<=>H+CH2	1.107E+08	1.790	1670.00
CH+H2O<=>H+CH2O	1.713E+13	.000	-755.00
CH+CH2<=>H+C2H2	4.000E+13	.000	.00
CH+CH3<=>H+C2H3	3.000E+13	.000	.00
CH+CH4<=>H+C2H4	6.000E+13	.000	.00
CH+CO(+M)<=>HCCO(+M)	5.000E+13	.000	.00
LOW /	2.690E+28	-3.740	1936.00/
TROE/	.5757	237.00	1652.00 5069.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH+CO2<=>HCO+CO	3.400E+12	.000	690.00
CH+CH2O<=>H+CH2CO	9.460E+13	.000	-515.00
CH+HCCO<=>CO+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH2+O2<=>OH+HCO	1.320E+13	.000	1500.00
CH2+H2<=>H+CH3	5.000E+05	2.000	7230.00
2CH2<=>H2+C2H2	3.200E+13	.000	.00
CH2+CH3<=>H+C2H4	4.000E+13	.000	.00
CH2+CH4<=>2CH3	2.460E+06	2.000	8270.00
CH2+CO(+M)<=>CH2CO(+M)	8.100E+11	.500	4510.00
LOW /	2.690E+33	-5.110	7095.00/
TROE/	.5907	275.00	1226.00 5185.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+HCCO<=>C2H3+CO	3.000E+13	.000	.00
CH2(S)+N2<=>CH2+N2	1.500E+13	.000	600.00
CH2(S)+AR<=>CH2+AR	9.000E+12	.000	600.00
CH2(S)+O2<=>H+OH+CO	2.800E+13	.000	.00
CH2(S)+O2<=>CO+H2O	1.200E+13	.000	.00
CH2(S)+H2<=>CH3+H	7.000E+13	.000	.00
CH2(S)+H2O(+M)<=>CH3OH(+M)	2.000E+13	.000	.00
LOW /	2.700E+38	-6.300	3100.00/
TROE/	.1507	134.00	2383.00 7265.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

CH2(S)+H2O<=>CH2+H2O	3.000E+13	.000	.00
CH2(S)+CH3<=>H+C2H4	1.200E+13	.000	-570.00
CH2(S)+CH4<=>2CH3	1.600E+13	.000	-570.00
CH2(S)+CO<=>CH2+CO	9.000E+12	.000	.00
CH2(S)+CO2<=>CH2+CO2	7.000E+12	.000	.00
CH2(S)+CO2<=>CO+CH2O	1.400E+13	.000	.00
CH2(S)+C2H6<=>CH3+C2H5	4.000E+13	.000	-550.00
CH3+O2<=>O+CH3O	2.675E+13	.000	28800.00
CH3+O2<=>OH+CH2O	3.600E+10	.000	8940.00
CH3+H2O2<=>HO2+CH4	2.450E+04	2.470	5180.00
2CH3(+M)<=>C2H6(+M)	2.120E+16	-.970	620.00
LOW /	1.770E+50	-9.670	6220.00/
TROE/	.5325	151.00	1038.00 4970.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2CH3<=>H+C2H5	4.990E+12	.100	10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO	2.648E+13	.000	.00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.320E+03	2.810	5860.00
CH3+CH3OH<=>CH2OH+CH4	3.000E+07	1.500	9940.00
CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	1.000E+07	1.500	9940.00
CH3+C2H4<=>C2H3+CH4	2.270E+05	2.000	9200.00
CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	6.140E+06	1.740	10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O	2.244E+18	-1.000	17000.00
HCO+M<=>H+CO+M	1.870E+17	-1.000	17000.00
H2/2.00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
HCO+O2<=>HO2+CO	7.600E+12	.000	400.00
CH2OH+O2<=>HO2+CH2O	1.800E+13	.000	900.00
CH3O+O2<=>HO2+CH2O	4.280E-13	7.600	-3530.00
C2H+O2<=>HCO+CO	5.000E+13	.000	1500.00
C2H+H2<=>H+C2H2	4.070E+05	2.400	200.00
C2H3+O2<=>HCO+CH2O	3.980E+12	.000	-240.00
C2H4(+M)<=>H2+C2H2(+M)	8.000E+12	.440	88770.00
LOW /	7.000E+50	-9.310	99860.00/
TROE/	.7345	180.00	1035.00 5417.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
C2H5+O2<=>HO2+C2H4	8.400E+11	.000	3875.00
HCCO+O2<=>OH+2CO	1.600E+12	.000	854.00
2HCCO<=>2CO+C2H2	1.000E+13	.000	.00
N+NO<=>N2+O	3.500E+13	.000	330.00
N+O2<=>NO+O	2.650E+12	.000	6400.00
N+OH<=>NO+H	7.333E+13	.000	1120.00
N2O+O<=>N2+O2	1.400E+12	.000	10810.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

$N_2O+O \rightleftharpoons 2NO$	2.900E+13	.000	23150.00
$N_2O+H \rightleftharpoons N_2+OH$	4.400E+14	.000	18880.00
$N_2O+OH \rightleftharpoons N_2+HO_2$	2.000E+12	.000	21060.00
$N_2O(+M) \rightleftharpoons N_2+O(+M)$	1.300E+11	.000	59620.00
LOW /	6.200E+14	.000	56100.00/
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
$HO_2+NO \rightleftharpoons NO_2+OH$	2.110E+12	.000	-480.00
$NO+O+M \rightleftharpoons NO_2+M$	1.060E+20	-1.410	.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
$NO_2+O \rightleftharpoons NO+O_2$	3.900E+12	.000	-240.00
$NO_2+H \rightleftharpoons NO+OH$	1.320E+14	.000	360.00
$NH+O \rightleftharpoons NO+H$	5.000E+13	.000	.00
$NH+H \rightleftharpoons N+H_2$	3.200E+13	.000	330.00
$NH+OH \rightleftharpoons HNO+H$	2.000E+13	.000	.00
$NH+OH \rightleftharpoons N+H_2O$	2.000E+09	1.200	.00
$NH+O_2 \rightleftharpoons HNO+O$	4.610E+05	2.000	6500.00
$NH+O_2 \rightleftharpoons NO+OH$	1.280E+06	1.500	100.00
$NH+N \rightleftharpoons N_2+H$	1.500E+13	.000	.00
$NH+H_2O \rightleftharpoons HNO+H_2$	2.000E+13	.000	13850.00
$NH+NO \rightleftharpoons N_2+OH$	2.160E+13	-.230	.00
$NH+NO \rightleftharpoons N_2O+H$	4.160E+14	-.450	.00
$NH_2+O \rightleftharpoons OH+NH$	7.000E+12	.000	.00
$NH_2+O \rightleftharpoons H+HNO$	4.600E+13	.000	.00
$NH_2+H \rightleftharpoons NH+H_2$	4.000E+13	.000	3650.00
$NH_2+OH \rightleftharpoons NH+H_2O$	9.000E+07	1.500	-460.00
$NNH \rightleftharpoons N_2+H$	3.300E+08	.000	.00
$NNH+M \rightleftharpoons N_2+H+M$	1.300E+14	-.110	4980.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
$NNH+O_2 \rightleftharpoons HO_2+N_2$	5.000E+12	.000	.00
$NNH+O \rightleftharpoons OH+N_2$	2.500E+13	.000	.00
$NNH+O \rightleftharpoons NH+NO$	7.000E+13	.000	.00
$NNH+H \rightleftharpoons H_2+N_2$	5.000E+13	.000	.00
$NNH+OH \rightleftharpoons H_2O+N_2$	2.000E+13	.000	.00
$NNH+CH_3 \rightleftharpoons CH_4+N_2$	2.500E+13	.000	.00
$H+NO+M \rightleftharpoons HNO+M$	8.950E+19	-1.320	740.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
$HNO+O \rightleftharpoons NO+OH$	2.500E+13	.000	.00
$HNO+H \rightleftharpoons H_2+NO$	4.500E+11	.720	660.00
$HNO+OH \rightleftharpoons NO+H_2O$	1.300E+07	1.900	-950.00
$HNO+O_2 \rightleftharpoons HO_2+NO$	1.000E+13	.000	13000.00
$CN+O \rightleftharpoons CO+N$	7.700E+13	.000	.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

CN+OH<=>NCO+H	4.000E+13	.000	.00
CN+H2O<=>HCN+OH	8.000E+12	.000	7460.00
CN+O2<=>NCO+O	6.140E+12	.000	-440.00
CN+H2<=>HCN+H	2.100E+13	.000	4710.00
NCO+O<=>NO+CO	2.350E+13	.000	.00
NCO+H<=>NH+CO	5.400E+13	.000	.00
NCO+OH<=>NO+H+CO	2.500E+12	.000	.00
NCO+N<=>N2+CO	2.000E+13	.000	.00
NCO+O2<=>NO+CO2	2.000E+12	.000	20000.00
NCO+M<=>N+CO+M	8.800E+16	-.500	48000.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NCO+NO<=>N2O+CO	2.850E+17	-1.520	740.00
NCO+NO<=>N2+CO2	5.700E+18	-2.000	800.00
HCN+M<=>H+CN+M	1.040E+29	-3.300	126600.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCN+O<=>NCO+H	1.107E+04	2.640	4980.00
HCN+O<=>NH+CO	2.767E+03	2.640	4980.00
HCN+O<=>CN+OH	2.134E+09	1.580	26600.00
HCN+OH<=>HOCN+H	1.100E+06	2.030	13370.00
HCN+OH<=>HNCO+H	4.400E+03	2.260	6400.00
HCN+OH<=>NH2+CO	1.600E+02	2.560	9000.00
H+HCN+M<=>H2CN+M	1.400E+26	-3.400	1900.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H2CN+N<=>N2+CH2	6.000E+13	.000	400.00
C+N2<=>CN+N	6.300E+13	.000	46020.00
CH+N2<=>HCN+N	2.857E+08	1.100	20400.00
CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)	3.100E+12	.150	.00
LOW /	1.300E+25	-3.160	740.00/
TROE/	.6670	235.00	2117.00 4536.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+N2<=>HCN+NH	1.000E+13	.000	74000.00
CH2(S)+N2<=>NH+HCN	1.000E+11	.000	65000.00
C+NO<=>CN+O	1.900E+13	.000	.00
C+NO<=>CO+N	2.900E+13	.000	.00
CH+NO<=>HCN+O	5.000E+13	.000	.00
CH+NO<=>H+NCO	2.000E+13	.000	.00
CH+NO<=>N+HCO	3.000E+13	.000	.00
CH2+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00
CH2+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH2(S)+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00

## Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

CH2(S)+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2(S)+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH3+NO<=>HCN+H2O	9.600E+13	.000	28800.00
CH3+NO<=>H2CN+OH	1.000E+12	.000	21750.00
HCNN+O<=>CO+H+N2	2.200E+13	.000	.00
HCNN+O<=>HCN+NO	2.000E+12	.000	.00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+H<=>CH2+N2	1.000E+14	.000	.00
HNCO+O<=>NH+CO2	9.800E+07	1.410	8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO	1.500E+08	1.570	44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH	2.200E+06	2.110	11400.00
HNCO+H<=>NH2+CO	2.250E+07	1.700	3800.00
HNCO+H<=>H2+NCO	1.050E+05	2.500	13300.00
HNCO+OH<=>NCO+H2O	4.650E+12	.000	6850.00
HNCO+OH<=>NH2+CO2	1.550E+12	.000	6850.00
HNCO+M<=>NH+CO+M	1.180E+16	.000	84720.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCNO+H<=>H+HNCO	2.100E+15	-.690	2850.00
HCNO+H<=>OH+HCN	2.700E+11	.180	2120.00
HCNO+H<=>NH2+CO	1.700E+14	-.750	2890.00
HOCN+H<=>H+HNCO	2.000E+07	2.000	2000.00
HCCO+NO<=>HCNO+CO	2.350E+13	.000	.00
CH3+N<=>H2CN+H	6.100E+14	-.310	290.00
CH3+N<=>HCN+H2	3.700E+12	.150	-90.00
NH3+H<=>NH2+H2	5.400E+05	2.400	9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O	5.000E+07	1.600	955.00
NH3+O<=>NH2+OH	9.400E+06	1.940	6460.00
END			

### 2. GRI 3.0

! GRI-Mech Version 3.0 7/30/99 CHEMKIN-II format  
! See README30 file at anonymous FTP site unix.sri.com, directory gri;  
! WorldWideWeb home page [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/) or  
! through <http://www.gri.org> , under 'Basic Research',  
! for additional information, contacts, and disclaimer  
ELEMENTS  
O H C N AR  
END

## SPECIES

H2 H O O2 OH H2O HO2 H2O2  
 C CH CH2 CH2(S) CH3 CH4 CO CO2  
 HCO CH2O CH2OH CH3O CH3OH C2H C2H2 C2H3  
 C2H4 C2H5 C2H6 HCCO CH2CO HCCOH N NH  
 NH2 NH3 NNH NO NO2 N2O HNO CN  
 HCN H2CN HCNH HCNO HOCN HNCO NCO N2  
 AR C3H7 C3H8 CH2CHO CH3CHO

END

!THERMO

! Insert GRI-Mech thermodynamics here or use in default file

!END

## REACTIONS

2O+M<=>O2+M 1.200E+17 -1.000 .00  
 H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/  
 O+H+M<=>OH+M 5.000E+17 -1.000 .00  
 H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
 O+H2<=>H+OH 3.870E+04 2.700 6260.00  
 O+HO2<=>OH+O2 2.000E+13 .000 .00  
 O+H2O2<=>OH+HO2 9.630E+06 2.000 4000.00  
 O+CH<=>H+CO 5.700E+13 .000 .00  
 O+CH2<=>H+HCO 8.000E+13 .000 .00  
 O+CH2(S)<=>H2+CO 1.500E+13 .000 .00  
 O+CH2(S)<=>H+HCO 1.500E+13 .000 .00  
 O+CH3<=>H+CH2O 5.060E+13 .000 .00  
 O+CH4<=>OH+CH3 1.020E+09 1.500 8600.00  
 O+CO(+M)<=>CO2(+M) 1.800E+10 .000 2385.00  
 LOW/ 6.020E+14 .000 3000.00/  
 H2/2.00/ O2/6.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/3.50/ C2H6/3.00/ AR/ .50/  
 O+HCO<=>OH+CO 3.000E+13 .000 .00  
 O+HCO<=>H+CO2 3.000E+13 .000 .00  
 O+CH2O<=>OH+HCO 3.900E+13 .000 3540.00  
 O+CH2OH<=>OH+CH2O 1.000E+13 .000 .00  
 O+CH3O<=>OH+CH2O 1.000E+13 .000 .00  
 O+CH3OH<=>OH+CH2OH 3.880E+05 2.500 3100.00  
 O+CH3OH<=>OH+CH3O 1.300E+05 2.500 5000.00  
 O+C2H<=>CH+CO 5.000E+13 .000 .00  
 O+C2H2<=>H+HCCO 1.350E+07 2.000 1900.00  
 O+C2H2<=>OH+C2H 4.600E+19 -1.410 28950.00  
 O+C2H2<=>CO+CH2 6.940E+06 2.000 1900.00  
 O+C2H3<=>H+CH2CO 3.000E+13 .000 .00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

O+C2H4<=>CH3+HCO	1.250E+07	1.830	220.00
O+C2H5<=>CH3+CH2O	2.240E+13	.000	.00
O+C2H6<=>OH+C2H5	8.980E+07	1.920	5690.00
O+HCCO<=>H+2CO	1.000E+14	.000	.00
O+CH2CO<=>OH+HCCO	1.000E+13	.000	8000.00
O+CH2CO<=>CH2+CO2	1.750E+12	.000	1350.00
O2+CO<=>O+CO2	2.500E+12	.000	47800.00
O2+CH2O<=>HO2+HCO	1.000E+14	.000	40000.00
H+O2+M<=>HO2+M	2.800E+18	-.860	.00
O2/ .00/ H2O/ .00/ CO/ .75/ CO2/1.50/ C2H6/1.50/ N2/ .00/ AR/ .00/			
H+2O2<=>HO2+O2	2.080E+19	-1.240	.00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O	11.26E+18	-.760	.00
H+O2+N2<=>HO2+N2	2.600E+19	-1.240	.00
H+O2+AR<=>HO2+AR	7.000E+17	-.800	.00
H+O2<=>O+OH	2.650E+16	-.6707	17041.00
2H+M<=>H2+M	1.000E+18	-1.000	.00
H2/ .00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO2/ .00/ C2H6/3.00/ AR/ .63/			
2H+H2<=>2H2	9.000E+16	-.600	.00
2H+H2O<=>H2+H2O	6.000E+19	-1.250	.00
2H+CO2<=>H2+CO2	5.500E+20	-2.000	.00
H+OH+M<=>H2O+M	2.200E+22	-2.000	.00
H2/ .73/ H2O/3.65/ CH4/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .38/			
H+HO2<=>O+H2O	3.970E+12	.000	671.00
H+HO2<=>O2+H2	4.480E+13	.000	1068.00
H+HO2<=>2OH	0.840E+14	.000	635.00
H+H2O2<=>HO2+H2	1.210E+07	2.000	5200.00
H+H2O2<=>OH+H2O	1.000E+13	.000	3600.00
H+CH<=>C+H2	1.650E+14	.000	.00
H+CH2(+M)<=>CH3(+M)	6.000E+14	.000	.00
LOW / 1.040E+26 -2.760 1600.00/			
TROE/ .5620 91.00 5836.00 8552.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH2(S)<=>CH+H2	3.000E+13	.000	.00
H+CH3(+M)<=>CH4(+M)	13.90E+15	-.534	536.00
LOW / 2.620E+33 -4.760 2440.00/			
TROE/ .7830 74.00 2941.00 6964.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/3.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH4<=>CH3+H2	6.600E+08	1.620	10840.00
H+HCO(+M)<=>CH2O(+M)	1.090E+12	.480	-260.00
LOW / 2.470E+24 -2.570 425.00/			
TROE/ .7824 271.00 2755.00 6570.00 /			

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+HCO<=>H2+CO 7.340E+13 .000 .00  
H+CH2O(+M)<=>CH2OH(+M) 5.400E+11 .454 3600.00  
LOW / 1.270E+32 -4.820 6530.00/  
TROE/ .7187 103.00 1291.00 4160.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/  
H+CH2O(+M)<=>CH3O(+M) 5.400E+11 .454 2600.00  
LOW / 2.200E+30 -4.800 5560.00/  
TROE/ .7580 94.00 1555.00 4200.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/  
H+CH2O<=>HCO+H2 5.740E+07 1.900 2742.00  
H+CH2OH(+M)<=>CH3OH(+M) 1.055E+12 .500 86.00  
LOW / 4.360E+31 -4.650 5080.00/  
TROE/ .600 100.00 90000.0 10000.0 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/  
H+CH2OH<=>H2+CH2O 2.000E+13 .000 .00  
H+CH2OH<=>OH+CH3 1.650E+11 .650 -284.00  
H+CH2OH<=>CH2(S)+H2O 3.280E+13 -.090 610.00  
H+CH3O(+M)<=>CH3OH(+M) 2.430E+12 .515 50.00  
LOW / 4.660E+41 -7.440 14080.0/  
TROE/ .700 100.00 90000.0 10000.0 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/  
H+CH3O<=>H+CH2OH 4.150E+07 1.630 1924.00  
H+CH3O<=>H2+CH2O 2.000E+13 .000 .00  
H+CH3O<=>OH+CH3 1.500E+12 .500 -110.00  
H+CH3O<=>CH2(S)+H2O 2.620E+14 -.230 1070.00  
H+CH3OH<=>CH2OH+H2 1.700E+07 2.100 4870.00  
H+CH3OH<=>CH3O+H2 4.200E+06 2.100 4870.00  
H+C2H(+M)<=>C2H2(+M) 1.000E+17 -1.000 .00  
LOW / 3.750E+33 -4.800 1900.00/  
TROE/ .6464 132.00 1315.00 5566.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H2(+M)<=>C2H3(+M) 5.600E+12 .000 2400.00  
LOW / 3.800E+40 -7.270 7220.00/  
TROE/ .7507 98.50 1302.00 4167.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H3(+M)<=>C2H4(+M) 6.080E+12 .270 280.00  
LOW / 1.400E+30 -3.860 3320.00/  
TROE/ .7820 207.50 2663.00 6095.00 /  
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/  
H+C2H3<=>H2+C2H2 3.000E+13 .000 .00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

---

H+C2H4(+M)<=>C2H5(+M)	0.540E+12	.454	1820.00
LOW / 0.600E+42 -7.620 6970.00/			
TROE/ .9753 210.00 984.00 4374.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H4<=>C2H3+H2	1.325E+06	2.530	12240.00
H+C2H5(+M)<=>C2H6(+M)	5.210E+17	-.990	1580.00
LOW / 1.990E+41 -7.080 6685.00/			
TROE/ .8422 125.00 2219.00 6882.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C2H5<=>H2+C2H4	2.000E+12	.000	.00
H+C2H6<=>C2H5+H2	1.150E+08	1.900	7530.00
H+HCCO<=>CH2(S)+CO	1.000E+14	.000	.00
H+CH2CO<=>HCCO+H2	5.000E+13	.000	8000.00
H+CH2CO<=>CH3+CO	1.130E+13	.000	3428.00
H+HCCOH<=>H+CH2CO	1.000E+13	.000	.00
H2+CO(+M)<=>CH2O(+M)	4.300E+07	1.500	79600.00
LOW / 5.070E+27 -3.420 84350.00/			
TROE/ .9320 197.00 1540.00 10300.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
OH+H2<=>H+H2O	2.160E+08	1.510	3430.00
2OH(+M)<=>H2O2(+M)	7.400E+13	-.370	.00
LOW / 2.300E+18 -.900 -1700.00/			
TROE/ .7346 94.00 1756.00 5182.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2OH<=>O+H2O	3.570E+04	2.400	-2110.00
OH+HO2<=>O2+H2O	1.450E+13	.000	-500.00
DUPLICATE			
OH+H2O2<=>HO2+H2O	2.000E+12	.000	427.00
DUPLICATE			
OH+H2O2<=>HO2+H2O	1.700E+18	.000	29410.00
DUPLICATE			
OH+C<=>H+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH<=>H+HCO	3.000E+13	.000	.00
OH+CH2<=>H+CH2O	2.000E+13	.000	.00
OH+CH2<=>CH+H2O	1.130E+07	2.000	3000.00
OH+CH2(S)<=>H+CH2O	3.000E+13	.000	.00
OH+CH3(+M)<=>CH3OH(+M)	2.790E+18	-1.430	1330.00
LOW / 4.000E+36 -5.920 3140.00/			
TROE/ .4120 195.0 5900.00 6394.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
OH+CH3<=>CH2+H2O	5.600E+07	1.600	5420.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

OH+CH3<=>CH2(S)+H2O	6.440E+17	-1.340	1417.00
OH+CH4<=>CH3+H2O	1.000E+08	1.600	3120.00
OH+CO<=>H+CO2	4.760E+07	1.228	70.00
OH+HCO<=>H2O+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH2O<=>HCO+H2O	3.430E+09	1.180	-447.00
OH+CH2OH<=>H2O+CH2O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH3O<=>H2O+CH2O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH3OH<=>CH2OH+H2O	1.440E+06	2.000	-840.00
OH+CH3OH<=>CH3O+H2O	6.300E+06	2.000	1500.00
OH+C2H<=>H+HCCO	2.000E+13	.000	.00
OH+C2H2<=>H+CH2CO	2.180E-04	4.500	-1000.00
OH+C2H2<=>H+HCCOH	5.040E+05	2.300	13500.00
OH+C2H2<=>C2H+H2O	3.370E+07	2.000	14000.00
OH+C2H2<=>CH3+CO	4.830E-04	4.000	-2000.00
OH+C2H3<=>H2O+C2H2	5.000E+12	.000	.00
OH+C2H4<=>C2H3+H2O	3.600E+06	2.000	2500.00
OH+C2H6<=>C2H5+H2O	3.540E+06	2.120	870.00
OH+CH2CO<=>HCCO+H2O	7.500E+12	.000	2000.00
2HO2<=>O2+H2O2	1.300E+11	.000	-1630.00
DUPLICATE			
2HO2<=>O2+H2O2	4.200E+14	.000	12000.00
DUPLICATE			
HO2+CH2<=>OH+CH2O	2.000E+13	.000	.00
HO2+CH3<=>O2+CH4	1.000E+12	.000	.00
HO2+CH3<=>OH+CH3O	3.780E+13	.000	.00
HO2+CO<=>OH+CO2	1.500E+14	.000	23600.00
HO2+CH2O<=>HCO+H2O2	5.600E+06	2.000	12000.00
C+O2<=>O+CO	5.800E+13	.000	576.00
C+CH2<=>H+C2H	5.000E+13	.000	.00
C+CH3<=>H+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH+O2<=>O+HCO	6.710E+13	.000	.00
CH+H2<=>H+CH2	1.080E+14	.000	3110.00
CH+H2O<=>H+CH2O	5.710E+12	.000	-755.00
CH+CH2<=>H+C2H2	4.000E+13	.000	.00
CH+CH3<=>H+C2H3	3.000E+13	.000	.00
CH+CH4<=>H+C2H4	6.000E+13	.000	.00
CH+CO(+M)<=>HCCO(+M)	5.000E+13	.000	.00
LOW / 2.690E+28 -3.740 1936.00/			
TROE/ .5757 237.00 1652.00 5069.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH+CO2<=>HCO+CO	1.900E+14	.000	15792.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

CH+CH2O<=>H+CH2CO	9.460E+13	.000	-515.00
CH+HCCO<=>CO+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH2+O2=>OH+H+CO	5.000E+12	.000	1500.00
CH2+H2<=>H+CH3	5.000E+05	2.000	7230.00
2CH2<=>H2+C2H2	1.600E+15	.000	11944.00
CH2+CH3<=>H+C2H4	4.000E+13	.000	.00
CH2+CH4<=>2CH3	2.460E+06	2.000	8270.00
CH2+CO(+M)<=>CH2CO(+M)	8.100E+11	.500	4510.00
LOW / 2.690E+33	-5.110	7095.00/	
TROE/	.5907	275.00	1226.00 5185.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+HCCO<=>C2H3+CO	3.000E+13	.000	.00
CH2(S)+N2<=>CH2+N2	1.500E+13	.000	600.00
CH2(S)+AR<=>CH2+AR	9.000E+12	.000	600.00
CH2(S)+O2<=>H+OH+CO	2.800E+13	.000	.00
CH2(S)+O2<=>CO+H2O	1.200E+13	.000	.00
CH2(S)+H2<=>CH3+H	7.000E+13	.000	.00
CH2(S)+H2O(+M)<=>CH3OH(+M)	4.820E+17	-1.160	1145.00
LOW / 1.880E+38	-6.360	5040.00/	
TROE/	.6027	208.00	3922.00 10180.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
CH2(S)+H2O<=>CH2+H2O	3.000E+13	.000	.00
CH2(S)+CH3<=>H+C2H4	1.200E+13	.000	-570.00
CH2(S)+CH4<=>2CH3	1.600E+13	.000	-570.00
CH2(S)+CO<=>CH2+CO	9.000E+12	.000	.00
CH2(S)+CO2<=>CH2+CO2	7.000E+12	.000	.00
CH2(S)+CO2<=>CO+CH2O	1.400E+13	.000	.00
CH2(S)+C2H6<=>CH3+C2H5	4.000E+13	.000	-550.00
CH3+O2<=>O+CH3O	3.560E+13	.000	30480.00
CH3+O2<=>OH+CH2O	2.310E+12	.000	20315.00
CH3+H2O2<=>HO2+CH4	2.450E+04	2.470	5180.00
2CH3(+M)<=>C2H6(+M)	6.770E+16	-1.180	654.00
LOW / 3.400E+41	-7.030	2762.00/	
TROE/	.6190	73.20	1180.00 9999.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2CH3<=>H+C2H5	6.840E+12	.100	10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO	2.648E+13	.000	.00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.320E+03	2.810	5860.00
CH3+CH3OH<=>CH2OH+CH4	3.000E+07	1.500	9940.00
CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	1.000E+07	1.500	9940.00
CH3+C2H4<=>C2H3+CH4	2.270E+05	2.000	9200.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	6.140E+06	1.740	10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O	1.500E+18	-1.000	17000.00
HCO+M<=>H+CO+M	1.870E+17	-1.000	17000.00
H2/2.00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
HCO+O2<=>HO2+CO	13.45E+12	.000	400.00
CH2OH+O2<=>HO2+CH2O	1.800E+13	.000	900.00
CH3O+O2<=>HO2+CH2O	4.280E-13	7.600	-3530.00
C2H+O2<=>HCO+CO	1.000E+13	.000	-755.00
C2H+H2<=>H+C2H2	5.680E+10	0.900	1993.00
C2H3+O2<=>HCO+CH2O	4.580E+16	-1.390	1015.00
C2H4(+M)<=>H2+C2H2(+M)	8.000E+12	.440	86770.00
LOW / 1.580E+51 -9.300 97800.00/			
TROE/ .7345 180.00 1035.00 5417.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
C2H5+O2<=>HO2+C2H4	8.400E+11	.000	3875.00
HCCO+O2<=>OH+2CO	3.200E+12	.000	854.00
2HCCO<=>2CO+C2H2	1.000E+13	.000	.00
N+NO<=>N2+O	2.700E+13	.000	355.00
N+O2<=>NO+O	9.000E+09	1.000	6500.00
N+OH<=>NO+H	3.360E+13	.000	385.00
N2O+O<=>N2+O2	1.400E+12	.000	10810.00
N2O+O<=>2NO	2.900E+13	.000	23150.00
N2O+H<=>N2+OH	3.870E+14	.000	18880.00
N2O+OH<=>N2+HO2	2.000E+12	.000	21060.00
N2O(+M)<=>N2+O(+M)	7.910E+10	.000	56020.00
LOW / 6.370E+14 .000 56640.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .625/			
HO2+NO<=>NO2+OH	2.110E+12	.000	-480.00
NO+O+M<=>NO2+M	1.060E+20	-1.410	.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NO2+O<=>NO+O2	3.900E+12	.000	-240.00
NO2+H<=>NO+OH	1.320E+14	.000	360.00
NH+O<=>NO+H	4.000E+13	.000	.00
NH+H<=>N+H2	3.200E+13	.000	330.00
NH+OH<=>HNO+H	2.000E+13	.000	.00
NH+OH<=>N+H2O	2.000E+09	1.200	.00
NH+O2<=>HNO+O	4.610E+05	2.000	6500.00
NH+O2<=>NO+OH	1.280E+06	1.500	100.00
NH+N<=>N2+H	1.500E+13	.000	.00
NH+H2O<=>HNO+H2	2.000E+13	.000	13850.00
NH+NO<=>N2+OH	2.160E+13	-.230	.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

NH+NO<=>N2O+H	3.650E+14	-.450	.00
NH2+O<=>OH+NH	3.000E+12	.000	.00
NH2+O<=>H+HNO	3.900E+13	.000	.00
NH2+H<=>NH+H2	4.000E+13	.000	3650.00
NH2+OH<=>NH+H2O	9.000E+07	1.500	-460.00
NNH<=>N2+H	3.300E+08	.000	.00
NNH+M<=>N2+H+M	1.300E+14	-.110	4980.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NNH+O2<=>HO2+N2	5.000E+12	.000	.00
NNH+O<=>OH+N2	2.500E+13	.000	.00
NNH+O<=>NH+NO	7.000E+13	.000	.00
NNH+H<=>H2+N2	5.000E+13	.000	.00
NNH+OH<=>H2O+N2	2.000E+13	.000	.00
NNH+CH3<=>CH4+N2	2.500E+13	.000	.00
H+NO+M<=>HNO+M	4.480E+19	-1.320	740.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HNO+O<=>NO+OH	2.500E+13	.000	.00
HNO+H<=>H2+NO	9.000E+11	.720	660.00
HNO+OH<=>NO+H2O	1.300E+07	1.900	-950.00
HNO+O2<=>HO2+NO	1.000E+13	.000	13000.00
CN+O<=>CO+N	7.700E+13	.000	.00
CN+OH<=>NCO+H	4.000E+13	.000	.00
CN+H2O<=>HCN+OH	8.000E+12	.000	7460.00
CN+O2<=>NCO+O	6.140E+12	.000	-440.00
CN+H2<=>HCN+H	2.950E+05	2.450	2240.00
NCO+O<=>NO+CO	2.350E+13	.000	.00
NCO+H<=>NH+CO	5.400E+13	.000	.00
NCO+OH<=>NO+H+CO	0.250E+13	.000	.00
NCO+N<=>N2+CO	2.000E+13	.000	.00
NCO+O2<=>NO+CO2	2.000E+12	.000	20000.00
NCO+M<=>N+CO+M	3.100E+14	.000	54050.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NCO+NO<=>N2O+CO	1.900E+17	-1.520	740.00
NCO+NO<=>N2+CO2	3.800E+18	-2.000	800.00
HCN+M<=>H+CN+M	1.040E+29	-3.300	126600.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCN+O<=>NCO+H	2.030E+04	2.640	4980.00
HCN+O<=>NH+CO	5.070E+03	2.640	4980.00
HCN+O<=>CN+OH	3.910E+09	1.580	26600.00
HCN+OH<=>HOCN+H	1.100E+06	2.030	13370.00
HCN+OH<=>HNCO+H	4.400E+03	2.260	6400.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

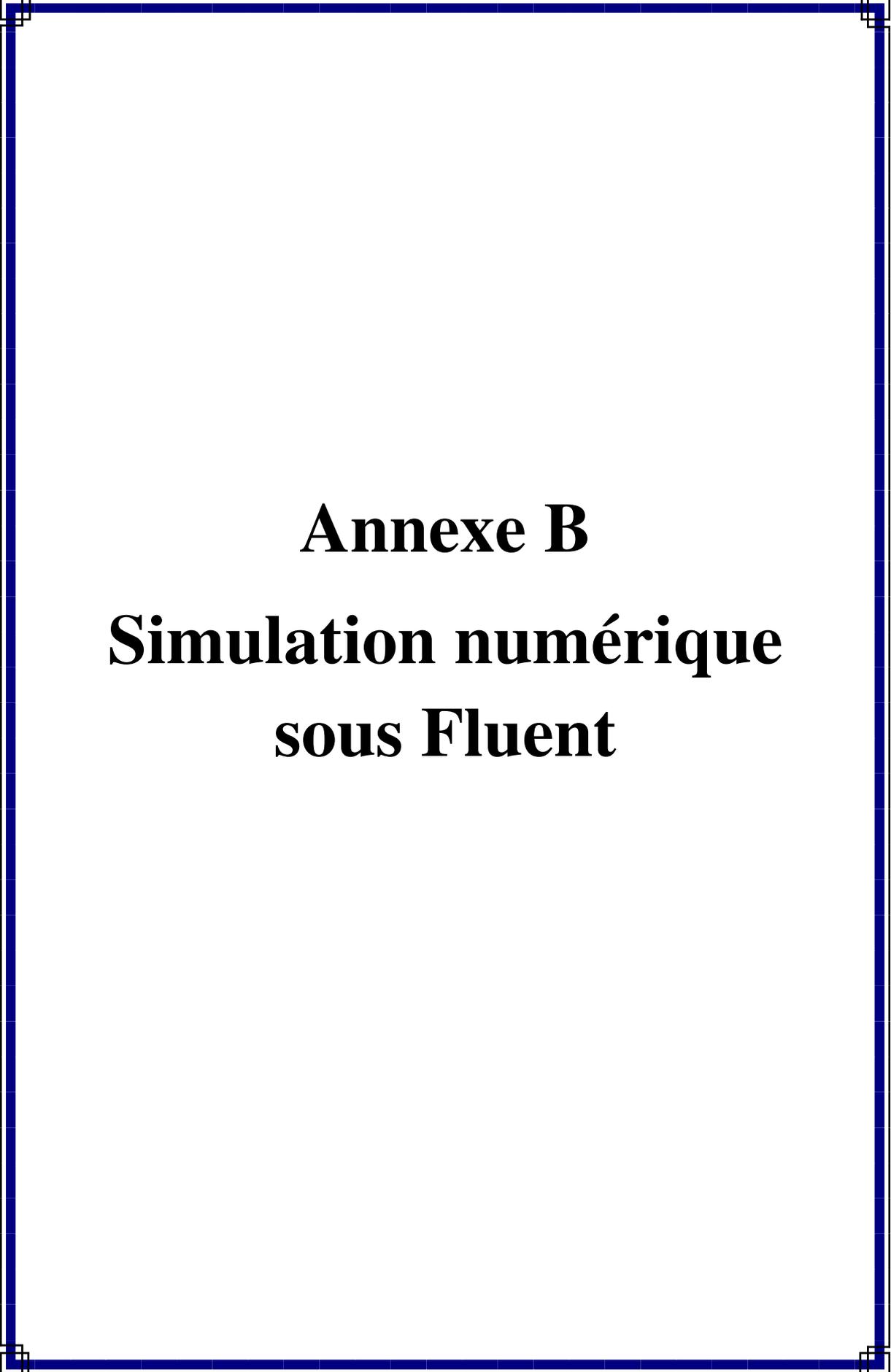
HCN+OH<=>NH2+CO	1.600E+02	2.560	9000.00
H+HCN(+M)<=>H2CN(+M)	3.300E+13	.000	.00
LOW / 1.400E+26 -3.400 1900.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H2CN+N<=>N2+CH2	6.000E+13	.000	400.00
C+N2<=>CN+N	6.300E+13	.000	46020.00
CH+N2<=>HCN+N	3.120E+09	0.880	20130.00
CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)	3.100E+12	.150	.00
LOW / 1.300E+25 -3.160 740.00/			
TROE/ .6670 235.00 2117.00 4536.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ 1.0/			
CH2+N2<=>HCN+NH	1.000E+13	.000	74000.00
CH2(S)+N2<=>NH+HCN	1.000E+11	.000	65000.00
C+NO<=>CN+O	1.900E+13	.000	.00
C+NO<=>CO+N	2.900E+13	.000	.00
CH+NO<=>HCN+O	4.100E+13	.000	.00
CH+NO<=>H+NCO	1.620E+13	.000	.00
CH+NO<=>N+HCO	2.460E+13	.000	.00
CH2+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00
CH2+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH2(S)+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00
CH2(S)+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2(S)+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH3+NO<=>HCN+H2O	9.600E+13	.000	28800.00
CH3+NO<=>H2CN+OH	1.000E+12	.000	21750.00
HCNN+O<=>CO+H+N2	2.200E+13	.000	.00
HCNN+O<=>HCN+NO	2.000E+12	.000	.00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+H<=>CH2+N2	1.000E+14	.000	.00
HNCO+O<=>NH+CO2	9.800E+07	1.410	8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO	1.500E+08	1.570	44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH	2.200E+06	2.110	11400.00
HNCO+H<=>NH2+CO	2.250E+07	1.700	3800.00
HNCO+H<=>H2+NCO	1.050E+05	2.500	13300.00
HNCO+OH<=>NCO+H2O	3.300E+07	1.500	3600.00
HNCO+OH<=>NH2+CO2	3.300E+06	1.500	3600.00
HNCO+M<=>NH+CO+M	1.180E+16	.000	84720.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCNO+H<=>H+HNCO	2.100E+15	-.690	2850.00

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

HCNO+H<=>OH+HCN	2.700E+11	.180	2120.00
HCNO+H<=>NH2+CO	1.700E+14	-.750	2890.00
HOCN+H<=>H+HNCO	2.000E+07	2.000	2000.00
HCCO+NO<=>HCNO+CO	0.900E+13	.000	.00
CH3+N<=>H2CN+H	6.100E+14	-.310	290.00
CH3+N<=>HCN+H2	3.700E+12	.150	-90.00
NH3+H<=>NH2+H2	5.400E+05	2.400	9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O	5.000E+07	1.600	955.00
NH3+O<=>NH2+OH	9.400E+06	1.940	6460.00
NH+CO2<=>HNO+CO	1.000E+13	.000	14350.00
CN+NO2<=>NCO+NO	6.160E+15	-0.752	345.00
NCO+NO2<=>N2O+CO2	3.250E+12	.000	-705.00
N+CO2<=>NO+CO	3.000E+12	.000	11300.00
O+CH3=>H+H2+CO	3.370E+13	.000	.00
O+C2H4<=>H+CH2CHO	6.700E+06	1.830	220.00
O+C2H5<=>H+CH3CHO	1.096E+14	.000	.00
OH+HO2<=>O2+H2O	0.500E+16	.000	17330.00
DUPLICATE			
OH+CH3=>H2+CH2O	8.000E+09	.500	-1755.00
CH+H2(+M)<=>CH3(+M)	1.970E+12	.430	-370.00
LOW/ 4.820E+25 -2.80 590.0 /			
TROE/ .578 122.0 2535.0 9365.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+O2=>2H+CO2	5.800E+12	.000	1500.00
CH2+O2<=>O+CH2O	2.400E+12	.000	1500.00
CH2+CH2=>2H+C2H2	2.000E+14	.000	10989.00
CH2(S)+H2O=>H2+CH2O	6.820E+10	.250	-935.00
C2H3+O2<=>O+CH2CHO	3.030E+11	.290	11.00
C2H3+O2<=>HO2+C2H2	1.337E+06	1.610	-384.00
O+CH3CHO<=>OH+CH2CHO	2.920E+12	.000	1808.00
O+CH3CHO=>OH+CH3+CO	2.920E+12	.000	1808.00
O2+CH3CHO=>HO2+CH3+CO	3.010E+13	.000	39150.00
H+CH3CHO<=>CH2CHO+H2	2.050E+09	1.160	2405.00
H+CH3CHO=>CH3+H2+CO	2.050E+09	1.160	2405.00
OH+CH3CHO=>CH3+H2O+CO	2.343E+10	0.730	-1113.00
HO2+CH3CHO=>CH3+H2O2+CO	3.010E+12	.000	11923.00
CH3+CH3CHO=>CH3+CH4+CO	2.720E+06	1.770	5920.00
H+CH2CO(+M)<=>CH2CHO(+M)	4.865E+11	0.422	-1755.00
LOW/ 1.012E+42 -7.63 3854.0 /			
TROE/ 0.465 201.0 1773.0 5333.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			

Annexe-A-Mécanismes réactionnels GRI 2.11 et le GRI 3.0

O+CH2CHO=>H+CH2+CO2	1.500E+14	.000	.00
O2+CH2CHO=>OH+CO+CH2O	1.810E+10	.000	.00
O2+CH2CHO=>OH+2HCO	2.350E+10	.000	.00
H+CH2CHO<=>CH3+HCO	2.200E+13	.000	.00
H+CH2CHO<=>CH2CO+H2	1.100E+13	.000	.00
OH+CH2CHO<=>H2O+CH2CO	1.200E+13	.000	.00
OH+CH2CHO<=>HCO+CH2OH	3.010E+13	.000	.00
CH3+C2H5(+M)<=>C3H8(+M)	.9430E+13	.000	.00
LOW/ 2.710E+74 -16.82 13065.0 /			
TROE/ .1527 291.0 2742.0 7748.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+C3H8<=>OH+C3H7	1.930E+05	2.680	3716.00
H+C3H8<=>C3H7+H2	1.320E+06	2.540	6756.00
OH+C3H8<=>C3H7+H2O	3.160E+07	1.800	934.00
C3H7+H2O2<=>HO2+C3H8	3.780E+02	2.720	1500.00
CH3+C3H8<=>C3H7+CH4	0.903E+00	3.650	7154.00
CH3+C2H4(+M)<=>C3H7(+M)	2.550E+06	1.600	5700.00
LOW/ 3.00E+63 -14.6 18170./			
TROE/ .1894 277.0 8748.0 7891.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+C3H7<=>C2H5+CH2O	9.640E+13	.000	.00
H+C3H7(+M)<=>C3H8(+M)	3.613E+13	.000	.00
LOW/ 4.420E+61 -13.545 11357.0/			
TROE/ .315 369.0 3285.0 6667.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+C3H7<=>CH3+C2H5	4.060E+06	2.190	890.00
OH+C3H7<=>C2H5+CH2OH	2.410E+13	.000	.00
HO2+C3H7<=>O2+C3H8	2.550E+10	0.255	-943.00
HO2+C3H7=>OH+C2H5+CH2O	2.410E+13	.000	.00
CH3+C3H7<=>2C2H5	1.927E+13	-0.320	.00
END			



**Annexe B**

**Simulation numérique**  
**sous Fluent**

## Annexe B

## Simulation numérique sous Fluent

Le Fluent est un logiciel commercial qui permet non seulement de faire des simulations numériques d'écoulement de fluides, mais également de traiter des phénomènes liés à un écoulement comme les transferts de chaleur et de masse ou la combustion [106].

Produit par la compagnie américaine ANSYS, ce logiciel est présenté comme l'un des leaders mondiaux en simulation numérique des écoulements fluides (CFD). Il est utilisé dans plusieurs domaines, notamment en aéronautique, en défense, pour le spatial, dans l'automobile, en énergie et génie des procédés, l'environnement, l'aérodynamique, la thermique du bâtiment et en biomécanique [106].

Le mot CFD est un acronyme du mot anglais Computational/Fluid Dynamics, le premier terme (Computational) fait référence à l'analyse numérique, aux mathématiques et aux calculs numérique, et le second (Fluid Dynamics) à la dynamique des fluides.

Les logiciels CFD, tel que Fluent, sont utilisés pour résoudre des problèmes de dynamique des fluides en écoulement par la construction d'un modèle numérique du système étudié.

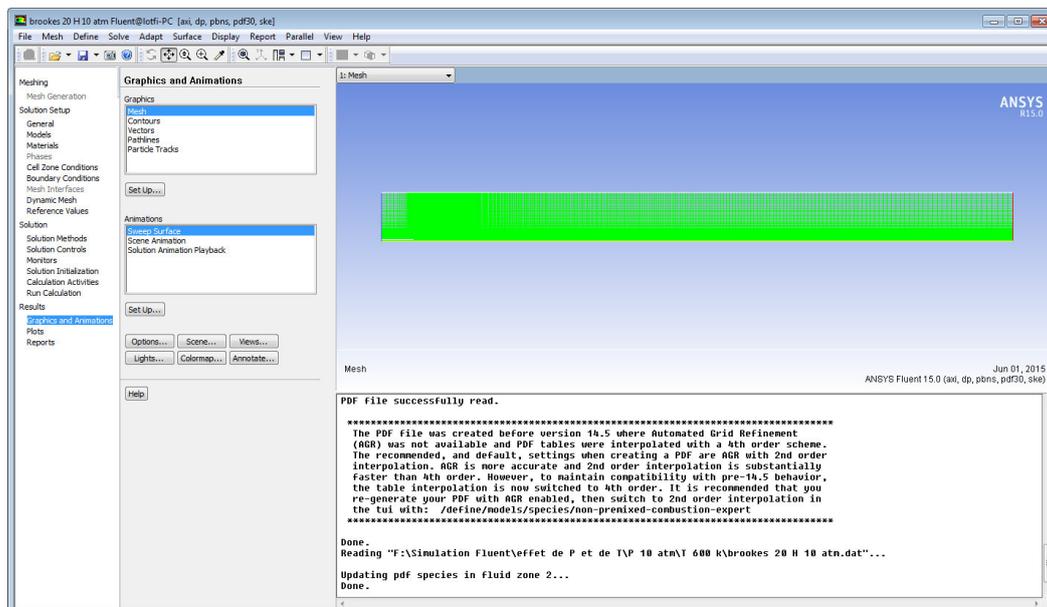


Figure B.1 : Interface du logiciel Fluent

Fluent est un solveur qui permet de faire la simulation sur fichier « case » contenant la géométrie et le maillage. Ce fichier est construit dans un logiciel dédié à cette tâche. L'un de ces logiciels est le Gambit.

### 1. Gambit

C'est un logiciel qui permet de construire la géométrie sur laquelle se déroulent l'écoulement et les phénomènes associés. Cette géométrie, que l'on appelle domaine de calcul, peut être construite en deux ou trois dimensions. Ce domaine est discrétisé en utilisant plusieurs algorithmes de maillage en deux ou trois dimensions.

Ce logiciel permet de fixer le type de conditions aux limites et le type de matériaux et même leurs natures (Fluide, Solide) dans le domaine de calcul.

Gambit est souvent considéré comme un mailleur de référence par les « modéliseurs » utilisant Fluent.

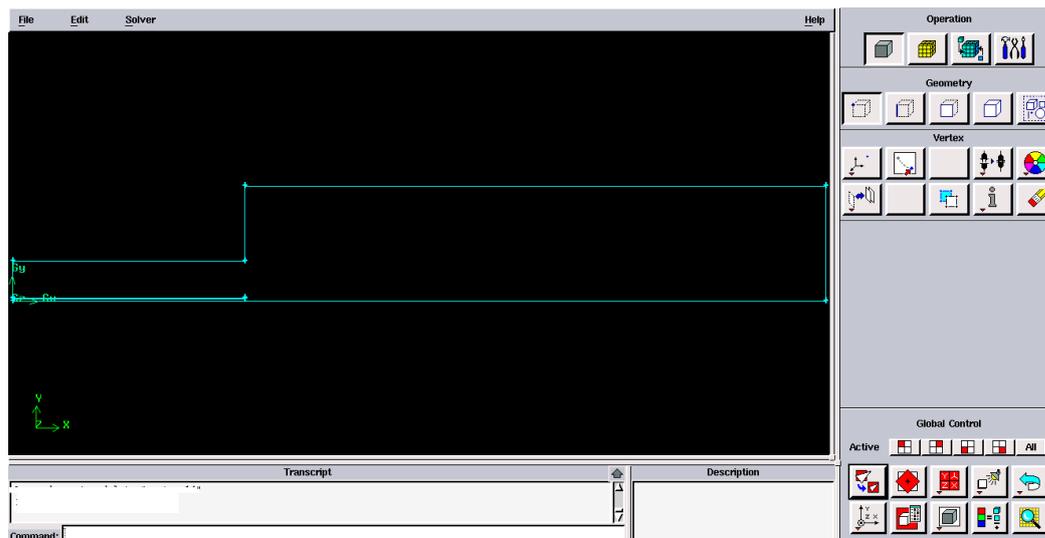


Figure B.2 : Interface du préprocesseur gambit

### 2. Méthodes des volumes finis

Les logiciels de CFD utilisent plusieurs méthodes numériques dont les :

- Méthodes des éléments finis (MEF).
- Méthodes des différences finies (MDF).
- Méthodes spectrales (MS).
- Méthodes des volumes finis (MVF).

Le code FLUENT comme la plupart des logiciels CFD utilise la méthode des volumes finis pour la modélisation numérique. L'avantage de cette méthode est qu'elle satisfait la conservation de masse, de quantité de mouvement et d'énergie.

La méthode des volumes finis consiste à intégrer les équations aux dérivées partielles sur des volumes de contrôle. Ces derniers sont définis autour de points de maillage. Il s'agit donc, de réduire le domaine de calcul à un ensemble de volumes de contrôles autour de points de maille.

En plus de son aspect conservatif, elle présente l'avantage de la possibilité d'être utilisée avec des maillages relativement grossiers, ce qui permet la mise en œuvre de code pour un coût raisonnable.

### 3. Discrétisation des équations de transport

Soit une entité thermodynamique  $\phi$ , l'équation de transport stationnaire de  $\phi$  peut être écrite sous la forme suivante [105]:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho U \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho V \phi) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho W \phi) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + S_{\phi} \quad (\text{B.1})$$

où :

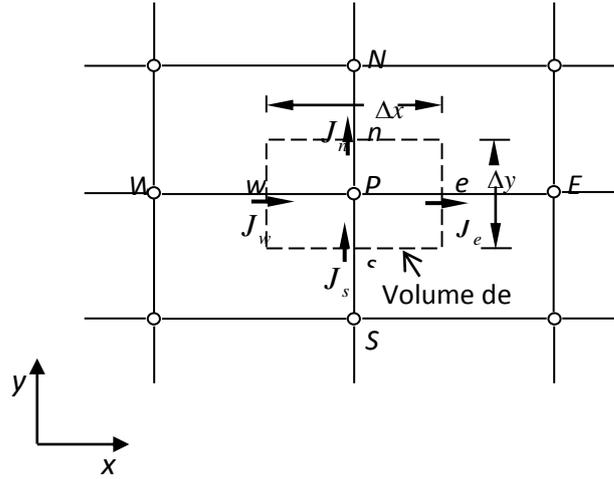
$x, y, z$  sont les coordonnées

$\rho$ , la masse volumique

$U, V, W$ , les composantes de la vitesse d'écoulement

$\Gamma_{\phi}$ , le coefficient de diffusion

$S_{\phi}$ , le terme source.



**Figure B.3:** Volume de contrôle pour un écoulement bidimensionnel

L'équation (B.1) est intégrée sur un volume de contrôle (figure B.1) sous la forme suivante :

$$J_e - J_w + J_n - J_s = \iiint_V S_\phi dV \quad (\text{B.2})$$

où :

$$J_e = \int_s^n \left( \rho U \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e dy = \left[ (\rho U)_e \phi_e - \frac{\Gamma_{\phi,e}}{\Delta x_{EP}} (\phi_E - \phi_P) \right] \Delta y_{ns}$$

$$J_w = \int_s^n \left( \rho U \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w dy = \left[ (\rho U)_w \phi_w - \frac{\Gamma_{\phi,w}}{\Delta x_{WP}} (\phi_P - \phi_W) \right] \Delta y_{ns}$$

$$J_n = \int_w^e \left( \rho V \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n dx = \left[ (\rho V)_n \phi_n - \frac{\Gamma_{\phi,n}}{\Delta x_{NP}} (\phi_N - \phi_P) \right] \Delta x_{ew}$$

$$J_s = \int_w^e \left( \rho V \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s dx = \left[ (\rho V)_s \phi_s - \frac{\Gamma_{\phi,s}}{\Delta x_{PS}} (\phi_P - \phi_S) \right] \Delta x_{ew}$$

les indices e, w, n, s, indiquent que les quantités correspondantes sont évaluées respectivement aux faces est, ouest, nord et sud, du volume de contrôle, et les quantités  $J_e$ ,  $J_w$ ,  $J_n$  et  $J_s$  sont les flux intégrés sur les faces est, ouest, nord et sud du volume de contrôle.

La tâche suivante consiste en l'évaluation de  $J_e$ ,  $J_w$ ,  $J_n$  et  $J_s$  et celle de l'approximation des quantités  $\phi_e$ ,  $\phi_w$ ,  $\phi_n$  et  $\phi_s$ .

L'équation de continuité :

$$\frac{\partial \rho U}{\partial x} + \frac{\partial \rho V}{\partial y} + \frac{\partial \rho W}{\partial z} = 0 \quad (\text{B.3})$$

Intégrée dans le volume de contrôle de la figure B.3 nous obtenons:

$$F_e - F_w + F_n - F_s = 0 \quad (\text{B.4})$$

où  $F_e$ ,  $F_w$ ,  $F_n$  et  $F_s$  sont les flux de masse de l'écoulement à travers les faces du volume de contrôle.

Ils sont définis par :  $F_e = (\rho U)_e \Delta y_{ns}$

$$F_w = (\rho U)_w \Delta y_{ns}$$

$$F_n = (\rho V)_n \Delta y_{ew} \quad (\text{B.5})$$

$$F_s = (\rho U)_s \Delta y_{ew}$$

L'intégration du terme source est donnée par :

$$\iiint_V S_\phi dV \cong S_U + S_P \phi_P \quad (\text{B.6})$$

L'équation (B.6) est donnée en supposant que le terme source est uniforme sur tout le volume de contrôle.

En considérant l'équation suivante :

$$(J_w - F_w \phi_P) + (J_n - F_n \phi_P) - (J_s - F_s \phi_P) = S_U + S_P \phi_P \quad (\text{B.7})$$

L'équation discrétisée complète peut s'écrire sous la forme:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (\text{B.8})$$

où :

$$a_E = D_e A(|P_e|) + -F_e, 0$$

$$a_W = D_w A(|P_w|) + F_w, 0$$

$$a_N = D_n A(|P_n|) + -F_n, 0$$

$$a_S = D_s A(|P_s|) + F_s, 0$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_P$$

$$b = S_U$$

avec 
$$D_e = \frac{\Gamma_e}{\delta x_e} \Delta y_{ns} ; D_w = \frac{\Gamma_w}{\delta x_w} \Delta y_{ns} ; D_n = \frac{\Gamma_n}{\delta y_n} \Delta x_{ew} ; D_s = \frac{\Gamma_s}{\delta y_s} \Delta x_{ew} \quad (B.9)$$

$D_e$ , représente les termes de diffusion à travers les quatre surfaces. Ainsi les termes  $P_e, P_w, P_n, P_s$  sont définis comme les nombres de Peclet et donnés par :

$$P_e = \frac{F_e}{D_e} ; P_w = \frac{F_w}{D_w} ; P_n = \frac{F_n}{D_n} ; P_s = \frac{F_s}{D_s} \quad (B.10)$$

Le terme  $A(|P|)$  est une fonction qui est déterminée en fonction du schéma de discrétisation choisi.

#### 4. Schémas de Discrétisation

Il existe plusieurs schémas de discrétisation dans la littérature qui ont été discutés en détail par Patankar (1980) [107], (tableau (B.1)) et Versteeg et Malalasekera (1995) [108].

Sous FLUENT, les variables stockées doivent être interpolées aux extrémités du volume de contrôle. Il est possible de choisir entre les différents schémas de discrétisation présentés dans le tableau B.1[109].

Schéma de discrétisation	Formule de $A( P )$
Centré	$1 - 0.5 P $
Décentré amont (Upwind)	1
Hybride	$\llbracket 0, 1 - 0.5 P  \rrbracket$
Loi de puissance	$\llbracket 0, (1 - 0.1 P )^5 \rrbracket$
Exponentiel (exacte)	$ P  / [\exp( P ) - 1]$

**Tableau B.1 :** Expression de la fonction  $A(|P|)$  pour différents schémas.

#### 5. Couplage pression-vitesse

Le couplage Vitesse-Pression est traité en résolvant les équations de quantité de mouvement et une équation pour la pression. La solution passe par la définition des vitesses sur une grille décalée "Staggered grid" et l'emploi d'algorithmes de couplage. Fluent dispose

de quatre algorithmes de couplage [107] :

- SIMPLE (Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations).
- SIMPLEC (SIMPLE Consistent).
- PISO (Pressure Implicit Solution by Split Operator)
- Algorithme couple.

## 6. Résolution numérique

Dans la partie précédente nous avons décrit la méthode des volumes finis, utilisée dans Fluent et qui permet la discrétisation des équations qui gouvernent l'écoulement turbulent et le transfert d'une entité  $\phi$  en chaque volume de contrôle élémentaire, sous la forme suivante :

$$h a_P \phi_{i,j} = a_E \phi_{i+1,j} + a_W \phi_{i-1,j} + a_N \phi_{i,j+1} + a_S \phi_{i,j-1} + b g \quad (\text{B.11})$$

Par cette démarche, un système d'équations algébriques est obtenu. La complexité du système d'équations dépend de la dimension du problème, du nombre de nœuds sur le maillage et de la méthode de discrétisation. Deux méthodes pour la résolution des équations algébriques, méthodes directes et indirectes ou itératives sont utilisées.

Les méthodes itératives sont basées sur le principe de la répétition d'un algorithme relativement simple qui mène à la convergence éventuelle après un certain nombre de répétitions de l'algorithme. Un exemple de ce type de méthode est celle de Jacobi ou de Gauss Seidel.

Dans Fluent, la résolution du système d'équations est obtenue et résolue par la méthode de Gauss-Seidel conjointement avec une méthode à grille multiple algébrique (*AMG*) [109].

## 7. Critère de convergence

L'utilisation de ce type de méthode (méthodes itératives), qui sont nécessaires pour la résolution d'un système non linéaire, implique l'apparition d'un résidu. Le résiduel pour la variable  $\phi$  dans chaque volume de contrôle est défini comme suit :

$$R_\phi = a_P \phi_P - \sum_i a_i \phi_i - S \quad (\text{B.12})$$

La convergence du calcul est synonyme d'un résiduel qui tend vers zéro. Ainsi la convergence du problème itératif est contrôlée par l'évolution des valeurs du résidu pour chaque variable.

## 8. Stabilité numérique

Dans un algorithme d'itération, les valeurs d'un système à une itération donnée dépendent de celles de l'itération précédente. Néanmoins pour accélérer ou améliorer la convergence la sous-relaxation est utilisée. Quand des valeurs appropriées de facteurs de sous-relaxation sont utilisées, cela permet d'optimiser l'algorithme de calcul et de stabiliser les résidus au cours des itérations.

Dans Fluent, la méthode de Gauss-Seidel est contrôlée par un coefficient de sous-relaxation  $\alpha$  [107]:

$$\phi^{(k)} = \phi^{(k-1)} + \alpha \Delta\phi \quad (\text{B.13})$$

où  $(k)$  représente l'avancement des itérations successives, et  $\Delta\phi$  la différence entre les résultats des deux itérations  $(k-1)$  et  $(k)$ .

Pour la résolution d'un problème quelconque associé à l'écoulement comme une flamme de diffusion turbulente les principales étapes de l'algorithme général du fonctionnement de Fluent sont illustrées par la figure B.4.

Après une initialisation des variables, le Fluent procède à une mise à jour des propriétés. L'étape suivante est la résolution des équations de l'écoulement, de l'équation de conservation de la quantité de mouvement et de l'équation de continuité. Cela permet de faire la mise à jour des flux massiques [109].

A ce niveau, il est possible de résoudre les équations de la turbulence, l'équation d'énergie et les équations de conservation des espèces dans une combustion. Puis la condition de convergence est vérifiée.

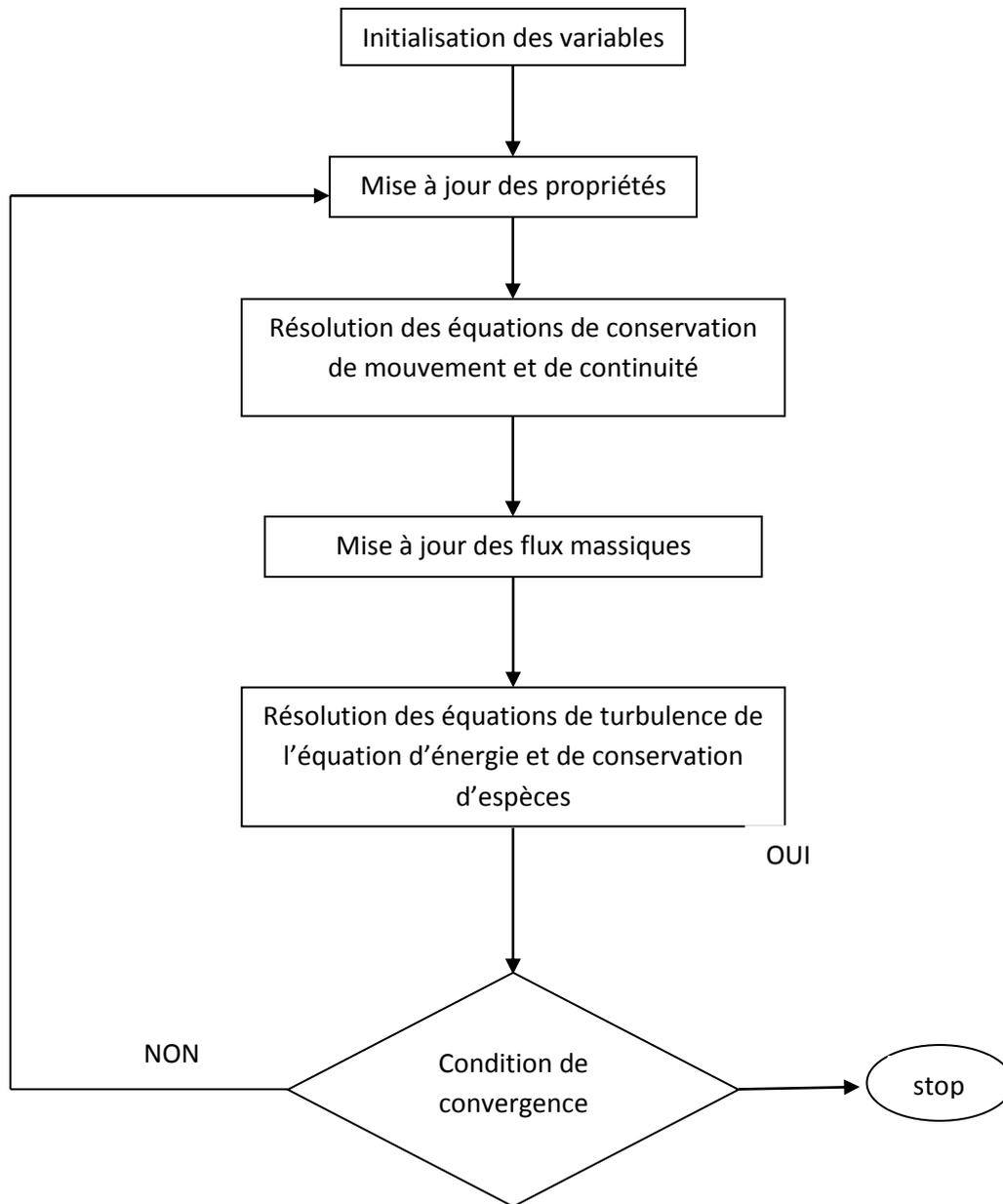


Figure B.4 : Schéma de fonctionnement de Fluent [109]

# Références

- 
- [1] B.Dudley, «BP Statistical Review of World Energy June 2015», BP Statistical Review of World Energy, 64th edition, (2015).
- [2] <https://www.worldenergy.org>.
- [3] T.Riis, E.F.Hagen, P.J. S.Vie, Ø.Ulleberg, «Hydrogen Production - Gaps and Priorities», IEA Hydrogen Implementing Agreement (HIA), (2005).
- [4] A.B.Stambouli, «Algerian renewable energy assessment: The challenge of sustainability», Energy Policy, vol.39, pp.4507–4519, (2011).
- [5] M.R.Yaiche, A.Bouhanik, S.M.A.Bekkouche, A.Malek, T.Benouaz, «Revised solar maps of Algeria based on sunshine duration », Energy Conversion and Management, vol.82, pp.114–123, (2014).
- [6] S.M.Boudia, A.Benmansour, N.Ghellai, M.Benmedjahed, M.A. Tabet Hellal, «Temporal assessment of wind energy resource at four locations in Algerian Sahara», Energy Conversion and Management, vol.76, pp.654–664, (2013).
- [7] R.Boudries, R.Dizene, «Potentialities of hydrogen production in Algeria», International Journal of Hydrogen Energy, vol. 33, pp.4476-4487, (2008).
- [8] R.Boudries, «Analysis of solar hydrogen production in Algeria: Case of an electrolyzer-concentrating photovoltaic system», International Journal of Hydrogen Energy, vol.38, pp.11507-11518, (2013).
- [9] J.F.Cassidy, «Emissions and total energy consumption of a multi-cylinder piston engine running on gasoline and a hydrogen-gasoline mixture», NASA technical note, (1977).
- [10] Association Française de l'Hydrogène «Les données de bases physico-chimiques sur l'hydrogène», Mémento de l'hydrogène, (2001).
- [11] S.Mokhatab, W.A.Poe, «Handbook of natural gas transmission and processing», Elsevier, (2012).
- [12] B.E.Milton, J.C.Keck, «Laminar burning velocities in stoichiometric hydrogen and hydrogen-hydrocarbon gas mixtures», Combustion and flame, vol.58, pp.3-22, (1984).
- [13] Z.Huang, B. Liu, K.Zeng, Y.Huang, D.Jiang, X.Wang, «Experimental Study on Engine Performance and Emissions for an Engine Fueled with Natural Gas - Hydrogen Mixtures», International Journal of Hydrogen Energy, vol.25, pp.2131–2136, (2006).
- [14] H.Miao, Q.Jiao, Z.Huang, D.Jiang, «Effect of initial pressure on laminar combustion characteristics of hydrogen enriched natural gas» International Journal of Hydrogen Energy, vol.33, pp.3876–3885, (2008).
- [15] J.Wang, Z.Huang, C.Tang, H.Miao, X.Wang, «Numerical study of the effect of hydrogen addition on methane–air mixtures combustion», International Journal of Hydrogen Energy, vol.34, pp.1084–1096, (2009).
- [16] H.Miao, M.Ji, Q.Jiao, Q.Huang, Z.Huang, «Laminar burning velocity and Markstein length of nitrogen diluted natural gas/hydrogen/air mixtures at normal, reduced and elevated pressures», International Journal of Hydrogen Energy, vol.34, pp.3145–3155, (2009).

- [17] R.Hoekstra, K.Collier, N.Mulligan, L.Chew, «Experimental study of a clean burning vehicle fuel», *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.20, pp.737-745, (1995).
- [18] S.R.Bell, M.Gupta, «Combustion Science and Technology Extension of the Lean Operating Limit for Natural Gas Fueling of a Spark Ignited Engine Using Hydrogen Blending Extension of the Lean Operating Limit for Natural Gas Fueling of a Spark Ignited Engine Using Hydrogen Blending», *Combustion science and technology*, vol.123, pp.23-48, (1996).
- [19] R.Sierens,E.Rosseel, «Variable composition hydrogen-natural gas mixtures for increased engine efficiency and decreased emissions», *ASME Spring Engine Technology Conference*, pp. 26-29, (1998).
- [20] P.Tunestal, M.Christensen, P.Einewall, T.Andersson, B.Johansson, «Hydrogen Addition For Improved Lean Burn Capability of Slow and Fast Burning Natural Gas Combustion Chambers», *Society of automotive engineers*, (2002).
- [21] P.Dimopoulos, C.Rechsteiner, P.Soltic, C.Laemmler, K.Boulouchos, «Increase of passenger car engine efficiency with low engine-out emissions using hydrogen–natural gas mixtures: A thermodynamic analysis», *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.32, pp.3073–3083, (2007).
- [22] G.Pede, E.Rossi, M.Chiesa, F.Ortenzi, «Test of blends of hydrogen and natural gas in a light duty vehicle», *Society of automotive engineers*, (2007).
- [23] P.Dimopoulos, C.Bach, P.Soltic, K.Boulouchos, «Hydrogen–natural gas blends fuelling passenger car engines: Combustion, emissions and well-to-wheels assessment» *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.33, pp.7224–7236, (2008).
- [24] L.DeSimio, M.Gambino, S.Iannaccone, «Use of hydrogen-methane mixtures for heavy duty engines», *12th World IANGV Conference and Exhibition*, pp.1–8, (2010).
- [25] A.Genovese, N.Contrisciani, F.Ortenzi, V.Cazzola, «On road experimental tests of hydrogen/natural gas blends on transit buses», *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.36, pp.1775–1783, (2011).
- [26] S.E.L.Mohammed, M.B.Baharom, a.R.a.Aziz, «Analysis of engine characteristics and emissions fueled by in-situ mixing of small amount of hydrogen in CNG», *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.36, pp.4029–4037, (2011).
- [27] C.Park, C.Kim, Y.Choi, S.Won, Y.Moriyoshi, «The influences of hydrogen on the performance and emission characteristics of a heavy duty natural gas engine», *International Journal of Hydrogen Energy*, vol.36, pp.3739–3745, (2011).
- [28] D. M. Todd, G. E. P. Systems, R. a Battista, «Demonstrated Applicability of Hydrogen Fuel for Gas Turbines», *Proceeding of chemical Engineeing conference on Gasification*, pp.1–11, (2000).
- [29] J.Wu, P.Brown, I.Diakunchak, A.Gulati, S. P.Generation, M.Lenze, B.Koestlin, «Advanced Gas Turbine Combustion System Development for High Hydrogen Fuels», *Proceeding of GT2007, ASME Turbo Expo 2007 Power Land, Sea Air May 14-17, Montreal Canada*, pp. 1–7, (2007).
- [30] M.Karbasi, I.Wierzba, «The effects of hydrogen addition on the stability limits of methane jet diffusion flames», *International journal of hydrogen energy*, vol.23, pp.123–129, (1998).

- [31] R.W.Schefer, «Combustion of Hydrogen-Enriched Methane in a Lean Premixed Swirl Burner», Proceeding of the 2001 DOE Hydrogen Program Review, pp.1–10, (2001).
- [32] H.J.Tomczak, G.Benelli, L.CarraiD.Cecchini, «Investigation of a gas turbine combustion system fired with mixtures of natural gas and hydrogen», IFRF Combustion Journal, Article Number 200207, (2002).
- [33] F.Halter, C.Chauveau, I.Gökalp, «Characterization of the effects of hydrogen addition in premixed methane/air flames», International Journal of Hydrogen Energy, vol.32, pp.2585–2592, (2007).
- [34] C.Cohé, F.Halter, C.Chauveau, I.Gökalp, O.L.Guidier, «Fractal characterization of high-pressure and hydrogen-enriched CH<sub>4</sub>-air turbulent premixed flames», Proceeding of the Combustion Institut, vol.31, pp.1345–1352, (2007).
- [35] A.Mameri, I.Gökalp, D.Boukeffa, «Simulation numérique de la stabilisation d'une flamme turbulente de méthane en régime pauvre par ajout d'hydrogène», Revue des Energies Renouvelables, vol.10, pp.39–48, (2007).
- [36] A.Parente, C.Galletti, L.Tognotti, «Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the MILD combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels» International Journal of Hydrogen Energy, vol.33, pp.7553–7564, (2008).
- [37] A.Mardani, S.Tabejamaat, «Effect of hydrogen on hydrogen-methane turbulent non-premixed flame under MILD condition», International Journal of Hydrogen Energy, vol.35, pp.11324–11331, (2010).
- [38] F.Tabet, B.Sarh, I.Gökalp, «Hydrogen-hydrocarbon turbulent non-premixed flame structure», International Journal of Hydrogen Energy, vol.34, pp.5040–5047, (2009).
- [39] N.Syred, M.Abdulsada, A.Griffiths, T.O'Doherty, P.Bowen, «The effect of hydrogen containing fuel blends upon flashback in swirl burners», Journal of Applied Energy, vol.8, pp.106–110, (2012).
- [40] B.Rohani, K.M.Saqr, «Effects of hydrogen addition on the structure and pollutant emissions of a turbulent unconfined swirling flame», International Communications in Heat and Mass Transfer, vol.39, pp. 681–688, (2012).
- [41] B.K.Slim, G.H.J.H.Darmeveil, D.L.vanDijk, G.T.Pieters, M.H.Rotink, J.J.Overdiep, H.B.Levinsky, «Should we add hydrogen to the natural gas grid to reduce CO<sub>2</sub> emissions? (Consequences for gas utilization equipment)», 23rd World Gas Conference, (2006).
- [42] J.L.Zachariah-Wolff, T.M.Egyedi, K.Hemmes, «From natural gas to hydrogen via the Wobbe index: The role of standardized gateways in sustainable infrastructure transitions», International Journal of Hydrogen Energy, vol.32, pp.1235–1245, (2007).
- [43] D.Haeseldonckx, W.D'haeseleer, «The Use Of The Natural-Gas Pipeline Infrastructure For Hydrogen Transport In A Changing Market Structure», Time working paper - Energy and Environment, KULeuven Energy Institute, (2008).
- [44] S.J.Brookes, J.B.Moss, «Measurements of soot production and thermal radiation from confined turbulent jet diffusion flames of methane», Combustion and Flame, vol.116, pp.49–61, (1999).
- [45] H.Kobayashi, K.Seyama, H.Hagiwara, Y.Ogami, «Burning velocity correlation of methane/air turbulent premixed flames at high pressure and high temperature», Proceeding of the Combustion Institute, vol.30, pp.827–834, (2005).

- [46] C.Cohé, F.Halter, C.Chauveau, I.Gökalp, Ö.L.Gülnder, «Fractal characterization of high-pressure and hydrogen-enriched CH<sub>4</sub>-air turbulent premixed flames», Proceeding of the Combustion Institute, vol.31, pp.1345–1352, (2007).
- [47] P.Griebel, P.Siewert, P.Jansohn, «Flame characteristics of turbulent lean premixed methane/air flames at high pressure: Turbulent flame speed and flame brush thickness», Proceeding of the Combustion Institute, vol.31, pp.3083–3090, (2007).
- [48] T.Poinsot, D.Veynante, «Theoretical and Numerical Combustion», R.T.Edwards, Philadelphia, United States of America, (2005).
- [49] J.Warnatz, U.Maas, R.W.Dibble, «Combustion, Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation», Springer, Berlin Heidelberg, 4th Edition, (2006).
- [50] R.J.Kee, M.E.Coltrin, P.Glarborg, « Reacting Flow Chemically Theory and Practice», John Wiley & Sons, Canada, (2003).
- [51] M.Liberman, «Introduction to Physics and Chemistry of Combustion», Springer, Berlin Heidelberg, (2008).
- [52] H.P.Miller, R.Mitchell, M.Smooke, R.Kee, «Towards a comprehensive chemical kinetic mechanism for the oxidation of acetylene: comparison of model predictions with results from flame and shock tube experiments», 19th international Symposium on Combustion, the Combustion Institute, Pittsburgh, 181-196, (1982).
- [53] F.A.Williams, «Combustion theory», Benjamin Cummings, Menlo Park, (1985).
- [54] J.O. Hinze, «Turbulence», McGrawHill, (1975).
- [55] M.Lesieur, O.Métais, P.Comte, «Large-Eddy Simulations of Turbulence», Cambridge University Press, (2005).
- [56] J.Cousteix, «Turbulence et couche limite», CEPADUES, Toulouse, France, (1989).
- [57] L.Selle, G.Lartigue, T.Poinsot, P.Kaufmann, W.Krebs, D.Veynante, «Large-eddy simulation of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry», Proceedings of the Summer Program, (2002).
- [58] K.K.Kuo, «Principles of Combustion», John Wiley, New York, (1986).
- [59] W.P.Jones, B.E.Lauder, «The prediction of laminarization with a 2-equation model of turbulence», International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.15, pp.301-314, (1972).
- [60] B.B.Dally, D.F.Fletcher, A.R.Masri, «Flow and mixing fields of turbulent bluff-body jets and flames», Combustion Theory and Modelling, vol.2, pp.193-219, (1998).
- [61] E.O'Brien, «The pdf approach to reacting turbulent flows. In Turbulent Reacting Flows», Topics in Applied Physics, Academic Press London, (1980).
- [62] S.B.Pope, «Pdf methods for turbulent reactive flows», Progress in Energy and Combustion Science, pp.119-192, (1985).
- [63] C.Dopazo, «Recent developments in pdf methods. In Turbulent Reacting Flows», Academic Press London, (1994).
- [64] N.Peters, «Turbulent combustion», Cambridge University Press, (2000).
- [65] D.B.Spalding, «Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames», Proceedings of the Combustion Institute, vol.13, pp.649–657, (1971).
- [66] B.Magnussen, B.Hjertager, «On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion», Proceedings of the Combustion Institute, vol.16, pp.719–729, (1977).

- [67] B.F.Magnussen, B.H.Mjertager, «On mathematical modeling of turbulent combustion», 16<sup>th</sup> International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.719-727, (1976).
- [68] N.Peters, «Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion», Progress in Energy and Combustion Science, vol.10, pp.319-339, (1984).
- [69] H.Pitsch, N.Peters, «Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames», 27th International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1057-1064, (1998).
- [70] E.Effelsberg, N.Peters, «Scalar dissipation rates in turbulent jets and jet diffusion flames», 22<sup>nd</sup> International Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.693-700, (1988).
- [71] S.K.Liew, K.N.C.Bray, J.B.Moss, «A stretched laminar flamelet model of turbulent non-premixed combustion», Combustion and Flame, vol.56, pp.199-213, (1984).
- [72] M.Ilbas, I.Yilmaz, Y.Kaplan, «Investigations of hydrogen and hydrogen-hydrocarbon composite fuel combustion and NO<sub>x</sub> emission characteristics in a model combustor», International Journal of Hydrogen Energy, vol.30, pp.1139–1147, (2005).
- [73] A.Frassoldati, P.Sharma, A.Cuoci, T.Faravelli, E.Ranzi, «Kinetic and fluid dynamics modeling of methane/hydrogen jet flames in diluted coflow», Applied Thermal Engineering, vol.30, pp.376–383, (2010).
- [74] S. B. Pope, «Advances in PDF Methods for PDF Calculations of Turbulent Flames», Proceedings of the Tenth European Turbulence Conference, pp.1–8, (2004).
- [75] F.Tabet, B.Sarh, I.Gökalp, «Turbulent non-premixed hydrogen-air flame structure in the pressure range of 1–10 atm», International Journal of Hydrogen Energy, vol.36, pp.15838–15850, (2011).
- [76] A.Heyl, H.Bockhorn, «Flamelet modeling of NO formation in laminar and turbulent diffusion flames», chemosphere, vol.42, pp.449–462, (2001).
- [77] J.Driscoll, «Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities», Progress in Energy and Combustion Science, vol.34, pp.91–134, (2008).
- [78] T.Mechanik, R.Aachen, F.Republic, «A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects», combustion and flame, vol.114, pp.26–40, (1998).
- [79] M.Hossain, W.Malalasekera, «Modelling of a bluff body stabilised CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> flames based on a laminar flamelet model with emphasis on NO prediction», Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: J. Power and Energy, vol.27, pp.201–210, (2003).
- [80] M.Hossain, W.Malalasekera, «Numerical study of bluff-body non-premixed flame structures using laminar flamelet model», Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: J. Power Energy, vol.219, pp.361–370, (2005).
- [81] D.Yilmaz, S.U.Onbasioglu, «Computational modeling of hydrogen enriched non-premixed turbulent methane air flames», Proceedings of the European Combustion Meeting, (2005).

- [82] M.Hossain, W.Malalasekera, «A combustion model sensitivity study for CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> bluff-body stabilized flame» Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C J, vol.221, pp.1377–1390, (2007).
- [83] M.Ravikanti, M.Hossain, W.Malalasekera, «Laminar flamelet model prediction of NO<sub>x</sub> formation in a turbulent bluff-body combustor», Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A J. Power Energy, vol.223, pp.41–54, (2009).
- [84] B.B.Dally, A.R.Masri, R.S.Barlow, G.J.Fiechtner, «Instantaneous and Mean Compositional Structure of Bluff-Body Stabilized Nonpremixed Flames», Combustion and Flame, vol.114, pp.119–148, (1998).
- [85] V.Bergmann, W.Meier, D.Wolff, W.Stricker, «Application of spontaneous Raman and Rayleigh scattering and 2D LIF for the characterization of a turbulent CH<sub>4</sub> /H<sub>2</sub> /N<sub>2</sub> jet diffusion flame», Applied Physics B: Lasers and Optics, vol.66, pp.489–502, (1998).
- [86] F.Tabet-Helal, B.Sarh et I.Gökalp, «Etude par simulation numérique des caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente avec co-courant d'air d'un mélange de CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>», Revue des Energies Renouvelables, vol.10, pp.173–180, (2007).
- [87] P.Kumar, D.P.Mishra, «Experimental investigation of laminar LPG–H<sub>2</sub> jet diffusion flame», International Journal of Hydrogen Energy, vol.33, pp.225-231, (2008).
- [88] D.P.Mishra, P.Kumar, «Experimental investigation of laminar LPG–H<sub>2</sub> jet diffusion flame with preheated reactants», Fuel, vol.87, pp.3091-3095, (2008).
- [89] L.Ziani, A.Chaker, K.Chetehouna, A.Malek, B.Mahmah, «Numerical simulations of non-premixed turbulent combustion of CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> mixtures using the PDF approach», International Journal of Hydrogen Energy, vol.38, pp.8597-8603, (2013).
- [90] H.Kobayashi, Y.Otawara, J.Wang, F.Matsuno, Y.Ogami, M.Okuyama, T.Kudo, S.Kadowaki, «Turbulent premixed flame characteristics of a CO/H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> mixture highly diluted with CO<sub>2</sub> in a high-pressure environment», Proceeding of the Combustion Institute, vol.34, pp.1437–1445, (2013).
- [91] B.B.Dally, N.Karpetis, R.S.Barlow, «Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow», Proceeding of the Combustion Institute, vol.29, pp.1147–1154, (2002).
- [92] A.Parente, C.Galletti, L.Tognotti, «Effect of the combustion model and kinetic mechanism on the MILD combustion in an industrial burner fed with hydrogen enriched fuels», International journal of hydrogen energy, vol.33, pp.7553–7564, (2008).
- [93] H.Kobayashi, «Experimental study of high-pressure turbulent premixed flames», Experimental Thermal and Fluid Science, vol.26, pp.375–387, (2002).
- [94] H.Kobayashi, K.Seyama, H.Hagiwara, Y.Ogami, «Burning velocity correlation of methane/air turbulent premixed flames at high pressure and high temperature», Proceeding of the Combustion Institute, vol.30, pp.827–834, (2005).
- [95] H.Kobayashi, H.Hagiwara, H.Kaneko, Y.Ogami, «Effects of CO<sub>2</sub> dilution on turbulent premixed flames at high pressure and high temperature», Proceeding of the Combustion Institute, vol.31, pp.1451–1458, (2007).
- [96] H.Kobayashi, T.Nakashima, T.Tamura, K.Maruta, T.Niioka, «Turbulence measurements and observations of turbulent premixed flames at elevated pressures up to 3.0 MPa», Combustion and Flame, vol.108, pp.104–117, (1997).

- 
- [97] L.Ziani, A.Chaker, «Ambient pressure effect on non-premixed turbulent combustion of CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>», International Journal of Hydrogen Energy, *Inpress* doi : 10.1016 / j.ijhydene. 2015.11.167, (2016).
- [98] C.W.Chiu, Y.C.Dong, S.S.Shy, «High-pressure hydrogen/carbon monoxide syngas turbulent burning velocities measured at constant turbulent Reynolds numbers», International Journal of Hydrogen Energy, vol.37, pp.10935–10946, (2012).
- [99] H.Kobayashi, T.Tamura, K.Maruta, T.Niioka, F.A.Williams, «Burning velocity of turbulent premixed flames in a high-pressure environment», Symposium (International) on Combustion, vol.26, pp.389–396, (1996).
- [100] C.C.Liu, S.S.Shy, C.W.Chiu, M.W.Peng, H.J.Chung, «Hydrogen/carbon monoxide syngas burning rates measurements in high-pressure quiescent and turbulent environment», International Journal of Hydrogen Energy, vol.36, pp.8595–8603, (2011).
- [101] A.Soika, F.Dinkelacker, A.Leipertz, «Pressure influence on the flame front curvature of turbulent premixed flames: comparison between experiment and theory», Combustion and Flame, vol.132, pp.451–462, (2003).
- [102] D.Bradley, M.Lawes, K.Liu, M.S.Mansour, «Measurements and correlations of turbulent burning velocities over wide ranges of fuels and elevated pressures», Proceeding of the Combustion Institute, vol.34, pp.1519–1526, (2013).
- [103] T.Lachaux, F.Halter, C.Chauveau, I.Gökalp, I.G.Shepherd, «Flame front analysis of high-pressure turbulent lean premixed methane–air flames», Proceeding of the Combustion Institute, vol.30, pp.819–826, (2005).
- [104] A.Kazakov, M.Frenklach, URL <http://www.me.berkeley.edu/drm/>.
- [105] G.P.Smith, D.M.Golden, M.Frenklach, N.W.Moriarty, B.Eiteneer, M.Goldenberg, C.T.Bowman, R.K.Hanson, S.Song, W.C.Gardiner, V.V.Lissianski, Z.Qin, URL <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>.
- [106] « FLUENT User's Guide », FLUENT Inc, (2013).
- [107] S.V.Patankar, « Numerical heat transfer and fluid flow », McGraw-Hill, (1983).
- [108] H.K.Versteeg, W.Malalasekera, «An introduction to computational fluid dynamics, the finite volume method», Longmen group limited, (1995).
- [109] « FLUENT Theory Guide », FLUENT Inc, (2013).

## دراسة العوامل المؤثرة في احتراق الميثان المخضب بالهيدروجين

### ملخص

أغلبية الطاقة المنتجة والمستخدمة في العالم تأتي من المحروقات. هذه الأنواع من الوقود تتسبب في انبعاث كميات كبيرة من الغازات المسببة للاحتباس الحراري وكذلك أنواع مختلفة من الملوثات مثل ثاني أكسيد الكربون، وأكاسيد النيتروجين والجسيمات الملوثة الأخرى. تبين أن إضافة الهيدروجين في الهيدروكربونات وسيلة واحدة للحد من هذه الانبعاثات. في الواقع، لقد تم إثبات في العديد من البحوث أن إضافة نسبة معينة من الهيدروجين في الهيدروكربونات يحسن أداء الاحتراق (تحسين الاستقرار اللهب، ونقص إنتاج الملوثات، الخ). الهيدروجين هو حامل جيد للطاقة، إضافته إلى الهيدروكربونات يمكن أن يكون وسيلة جيدة لإدخال الطاقات المتجددة.

في هذا العمل، تم علاج تأثير الهيدروجين على شعلتين ذات إسهاب هائج. يتم الحصول على الشعلة الأولى من محرق محوري يتسرب الوقود عبر المسار المركزي. قارنا أداء ثلاثة نماذج (k-ε، ونموذج RSM و k-ε المعدل) وأداء مخططين الحركية مفصلة GRI 3 و GRI 2.11. و غيرن النسبة حجمية من الهيدروجين من 0 إلى 50٪ لهذه الشعلة. و درسنا تأثير الهيدروجين على هيكل الشعلة، الطاقة الحرارية المنتجة، و على إنتاج الغازات الملوثة مثل أكسيد النيتريك و أول أكسيد الكربون.

وينتج اللهب الثاني من محرق محوري ذات شعلة ثانوية الهدف منها الحفاظ على الشعلة الرئيسية. غيرنا لهذه الشعلة، في وقت واحد درجة الحرارة الابتدائية، الضغط المحيط ومحتوى الهيدروجين. وتتغير درجة الحرارة الابتدائية من 290 إلى K600، والضغط من 1 إلى 10 جوي ونسبة الهيدروجين من 10 إلى 30٪.

تبين لنا أن إضافة الهيدروجين في كلتا الحالتين يؤدي إلى الحد من توسيع شعاعي ومحوري للشعلة مع تضيق منطقة التفاعل؛ كما أنه يسبب زيادة في درجة حرارة الاحتراق، والتي تتسبب في زيادة في انبعاثات أكسيد النيتريك.

الزيادة في الضغط يؤدي إلى تضيق اللهب ويقلل من تأثير الهيدروجين. أخيراً، زيادة درجة الحرارة الابتدائية يسبب زيادة في معدل استهلاك الوقود.

**الكلمات المفتاحية:** احتراق هائج، المحاكاة الرقمية، شعلة ذات إسهاب هائج، تخصيب بالهيدروجين.

## Parametric study of the combustion of methane with hydrogen blend

### Abstract

Most of the energy produced and used in the world comes from fossil fuels. The combustion of these fuels cause the emission of significant quantities of greenhouse gases as well as different types of pollutants such as CO, NO<sub>x</sub> and other pollutant particles. The addition of hydrogen in hydrocarbons appears to be a promising way to reduce these emissions. Indeed, it has been demonstrated by several authors that the addition of certain quantities of hydrogen in hydrocarbons improves combustion performance (improves flame stability, pollution, etc). As hydrogen is a good energy carrier, its addition to hydrocarbons could be a good way for the introduction of renewable energies.

In this work, we focus on the effect of hydrogen on two turbulent diffusion flames methane. The first flame is obtained with a burner coaxial configuration where the jet of fuel is in the center. The second flame is produced by a coaxial burner with a pilot flame. The role of the pilot flame is to maintain the flame. For the first configuration we compared the performance of three turbulence models (the standard  $k-\epsilon$ , the RSM model and the modified  $k-\epsilon$ ) and the performance of two detailed kinetic schemes, the GRI 2.11 and the GRI 3. We do vary the volumetric fraction of hydrogen from 0 to 50% for this flame. Attention was given, here, to the hydrogen effect on the flame structure, the heat power produced, as well as to the effect on the production of polluting gases such as nitric oxide and carbon monoxide.

For second case, we simultaneously vary the initial temperature, the ambient pressure and the hydrogen fraction. The initial temperature is varied from 290 to 600 K, the pressure of 1 to 10 atm and hydrogen volumetric fraction of hydrogen from 10 to 30%.

We have noted that the addition of hydrogen in both cases causes a reduction of the radial and axial expansion of the flame with reduction of the reaction zone; It also causes an increase of the combustion temperature, which induced an increase in nitric oxide emissions.

The increase in pressure causes a narrowing of the flame and reduces the effect of hydrogen. Finally, increasing the initial temperature causes an increase in the fuel consumption rate.

**Keywords :** turbulent combustion, numerical simulation, CFD, turbulent diffusion flame, hydrogen blend.

## Résumé

La majeure partie de l'énergie produite et utilisée dans le monde provient des énergies fossiles. Ces combustibles provoquent l'émission de quantités importantes de gaz à effet de serre ainsi que différents types de polluants comme le CO, les NO<sub>x</sub> et d'autres particules polluantes. Afin de réduire ces émissions, l'ajout d'hydrogène dans les hydrocarbures semble être une voie prometteuse. De plus, plusieurs auteurs ont démontrés que l'ajout d'une proportion d'hydrogène adéquate dans les hydrocarbures améliore les performances de la combustion (meilleure stabilité des flammes, réduction de la pollution, etc). L'hydrogène étant un bon vecteur énergétique, son ajout aux hydrocarbures pourrait être également un bon moyen pour l'introduction des énergies renouvelable.

Dans ce travail de thèse, l'effet de l'hydrogène sur deux flammes de diffusion turbulente du méthane est traité. La première flamme est obtenue avec un brûleur de configuration coaxial dont le jet du carburant se trouve au centre et la seconde flamme est produite par un brûleur coaxial comprenant une flamme pilote, dont le rôle est le maintien de la flamme. Pour la première configuration les performances de trois modèles de turbulence (le  $k-\varepsilon$  standard, le modèle RSM et le  $k-\varepsilon$  modifié) ainsi que les performances de deux schémas cinétiques détaillés (GRI 2.11 et GRI 3) ont été comparés. Le taux volumique d'hydrogène est varié de 0 à 50 %. L'effet de l'hydrogène sur la structure de la flamme, sur la puissance thermique produite, ainsi que sur la production de gaz polluants tel que le monoxyde d'azote et le monoxyde de carbone a été finement examiné.

Pour le second cas, la température initiale, la pression ambiante ainsi que le taux d'hydrogène sont variés simultanément. Les valeurs sont de 290 à 600 K pour la température, de 1 à 10 atm pour la pression et de 10 à 30 % pour le taux d'hydrogène

Les résultats obtenus montrent que l'ajout d'hydrogène provoque dans les deux cas, une réduction des expansions radiale et axiale de la flamme avec une réduction de la zone de réaction. IL conduit également à une augmentation de la température de combustion, ce qui induit un accroissement des émissions de monoxyde d'azote.

Par ailleurs, l'augmentation de la pression induit un rétrécissement de la flamme et réduit l'effet de l'hydrogène, alors que la hausse de la température initiale provoque l'accroissement de la vitesse de consommation des carburants.

**Mots clefs:** combustion turbulente, simulation numérique, flamme de diffusion turbulente, enrichissement par de l'hydrogène.