

وزارة الجامعات
Ministère aux Universités

ECOLE NATIONALE POLYTECHNIQUE

المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات
BIBLIOTHEQUE — المكتبة
Ecole Nationale Polytechnique

DEPARTEMENT

GENIE MECANIQUE

PROJET DE FIN D'ETUDES 2er

SUJET

MODELISATION D'UNE FLAMME
DE DIFFUSION LAMINAIRE

Proposé par M. BENKOUSSAS B. Etudié par M. LAOUIR A.

Dirigé par M. BENKOUSSAS

PROMOTION 1991

الهدف من هذا العمل هو إيجاد حل حسابي
لمنظومة المعادلات المتعلقة بشعلة إنبثاث
ذات تناظر محوري. خصائص الوسط تفترض
ثابتة.

L'OBJET DE CE TRAVAIL EST DE TROUVER UNE SOLUTION
NUMERIQUE AU SYSTEME D'EQUATIONS REGISSANT UNE FLAMME DE
DIFFUSION LAMINAIRE AXISYMETRIQUE A PARAMETRES PHYSIQUES
CONSTANTS.

THE OBJECT OF THIS WORK IS TO FIND A NUMERICAL SOLUTION
FOR THE GOVERNING EQUATIONS OF AN AXISYMMETRICAL LAMINAR
DIFFUSION FLAME. THE PHYSICAL PARAMETERS ARE SUPPOSED
CONSTANT.

“ Ce qui compte, ce n'est pas ce que vous apprenez,
mais ce que vous faites..... Savoir c'est agir”

Marcelle Auclair

“ Ce qui change le monde, ce ne sont pas les idées
nouvelles; c'est l'application de ces idées à un
besoin.”

Louis Pauwels

T A B L E D E S M A T I E R E S

Chapitre 1

APERCU GENERALE SUR LA COMBUSTION

| | |
|---|----|
| I) INTRODUCTION | 4 |
| II) CERTAINES CARACTERISTIQUES D'UN COMBUSTIBLE | 4 |
| Pouvoir calorifique. Pouvoir comburivore. Pouvoir fumigène. | |
| III) GRANDEURS CARACTERISANT UN MELANGE CARBURANT-COMBURANT-INERTE | 5 |
| Limite d'inflammabilité. Température d'inflammation Limite extrême d'inflammabilité. | |
| IV) PROPAGATION DE LA COMBUSTION | 6 |
| Vitesse fondamentale de déflagration. La détonation | |
| V) LA COMBUSTION VUE SOUS SON ASPECT CHIMIQUE | 9 |
| VI) VITESSE DE REACTION | 10 |

Chapitre 2

LES FLAMMES: APPROCHE QUALITATIVE

| | |
|---------------------------------|----|
| I) INTRODUCTION | 13 |
| II) FLAMMES A PREMELANGE | 13 |
| III) FLAMMES DE DIFFUSION | 14 |

| | |
|--|----|
| IV) DIAGRAMME DE FONCTIONNEMENT D'UN BRULEUR | 18 |
| V) RAYONNEMENT ET EMISSION DE LUMIERE DANS LES FLAMME | 19 |
| VI) EFFET DE LA PRESSION SUR LES FLAMMES | 20 |
| VII) EFFECT DE LA GRAVITE SUR LES FLAMMES | 21 |

Chapitre 3

MODELE MATHEMATIQUE DE LA FLAMME DE DIFFUSION LAMINAIRE AXISYMETRIQUE

| | |
|--|----|
| I) DEDUCTION DU MODELE COMPTE TENU DES HYPOTHESES..... | 23 |
| II) FORME FINALE DU SYSTEME D'EQUATIONS | 24 |
| III) CAS D'UNE REACTION INFINIMENT RAPIDE | 25 |
| IV) ETAPES A SUIVRE POUR L'INTEGRATION | 27 |
| V) CONDITIONS AUX LIMITES ET INITIALES | 27 |

Chapitre 4

INTEGRATION NUMERIQUE

| | |
|---|----|
| I) INTRODUCTION | 31 |
| II) CALCUL DES VITESSES | 31 |
| III) CALCUL DES CONCENTRATIONS ET DES TEMPERATURES SOUS L'HYPOTHESE D'UNE REACTION INFINIMENT RAPIDE.. | 40 |

| | |
|--|----|
| IV) CALCUL DES CONCENTRATIONS ET DES TEMPERATURES: REACTION A VITESSE FINIE | 46 |
| V) CALCUL DES CONCENTRATIONS DU GAZ NEUTRE | 47 |
| VI) DEDUCTION DES CONCENTRATIONS EN PRODUITS DE COMBUSTION | 49 |
| CONCLUSION - - - - - | 52 |
| ANNEXE - - - - - | 55 |
| LISTING DES PROGRAMMES - - - - - | 70 |
| REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES - - - - - | 88 |

I N T R O D U C T I O N

Dans le monde industriel, la production de l'énergie calorifique reste dominée par l'utilisation des combustibles; ils ont l'avantage d'avoir une grande souplesse d'utilisation comparés aux autres sources d'énergies (nucléaire, solaire). Dans certains domaines, comme le transport, ils restent la source d'énergie la plus commode et la plus rationnelle, pour la propulsion.

Les combustibles sont de grande diversité, selon leurs état (solide, liquide, gaz) ou leurs composition chimique; la propriété qu'ils ont en commun et qui les réunit sous le même nom, est qu'ils s'associent avec l'oxygène en produisant de la chaleur. Un phénomène spectaculaire et fort complexe accompagne cette transformation se résume sous le nom de "flamme".

Actuellement, près de 1% des quantités de combustibles utilisés est perdu suite à des réactions incomplètes; même si l'on admettait qu'économiquement parlant, ce pourcentage est faible, le problème est à apprendre au sérieux lorsqu'on sait que cette fraction est rejetée sous forme de polluants. Ceci a incité les spécialistes à pousser les recherches dans le domaine de la combustion sur différents fronts.

La simulation est une technique très intéressante qui consiste à trouver un modèle mathématique décrivant le plus fidèlement possible un phénomène ou le comportement d'un système, pour l'utiliser ensuite sur ordinateur et réaliser ainsi de véritables expériences, sans avoir recours au laboratoire souvent très coûteux; d'où son aspect économique. En combustion, l'un des axes de recherche qui connaît un développement incessant est incontestablement 'la modélisation des flammes' qui a pour fin la simulation des flammes sur ordinateur.

La description d'une flamme se réalise par la connaissance des distributions dans l'espace des vitesses, de la température, de la densité et des concentrations des espèces chimiques existantes.

Ceci se fait par l'intégration numérique du système d'équations différentielles régissant la flamme compte tenu des conditions aux limites ,et c'est là que réside le problème de la modélisation qui est donc purement numérique.

Le souci permanent des chercheurs est de se rapprocher le plus près possible du cas réel, ceci en tenant compte de plus en plus des phénomènes qui furent au début négligés; le problème numérique se complique alors incessamment et nécessite plus d'efforts pour l'élaboration de techniques de calcul qui doivent répondre à des exigences d'efficacité et de précision.

Ce travail, est une tentative de trouver une solution numérique au modèle mathématique décrivant la flamme de diffusion laminaire axisymétrique compte tenu de certaines hypothèses simplificatrices plus ou moins discutables; la méthode numérique utilisée est celle des différences finis .

La modélisation des flammes de diffusion laminares constitue une première étape pour modéliser les flammes de diffusion turbulentes par la méthode des flammelèttes.

CHAPITRE 1

APERÇU GÉNÉRAL
SUR LA COMBUSTION

1) INTRODUCTION:

La combustion est une réaction chimique entre un corps combustible dit "carburant" et un "comburant" le plus souvent l'oxygène de l'air.

Selon les réactifs mis en jeu et les conditions du milieu réactionnel, la combustion peut être lente (comme l'oxydation du fer à l'air libre) ou vive (combustion d'hydrocarbures dans l'air); dans le second cas, on dit que le combustible brûle.

La combustion vive donne naissance à des flammes caractérisées par un grand déséquilibre chimique et par la même thermodynamique due à l'emballement de la réaction chimique.

II) CERTAINES CARACTERISTIQUES D'UN COMBUSTIBLE :

II.1-Pouvoir calorifique:

C'est la quantité de chaleur dégagée après combustion d'un kg de combustible; si celui ci est gazeux, c'est la chaleur dégagée par la combustion de 1 m³ de ce gaz pris dans les conditions normales (1 Nm³).

Si la réaction produit de l'eau, on définit alors le pouvoir calorifique supérieur PCS et inférieur PCI selon que l'eau produite est considérée à l'état liquide ou gazeux. Il est clair que PCS > PCI. Les réactions de combustion sont très exothermiques et l'eau est produite à l'état gazeux, c'est pour cela qu'en pratique on considère seulement le PCI.

II.2-Pouvoir comburivore:

C'est le volume d'air nécessaire et suffisant (mélange stoechiométrique) exprimé en m³ pour assurer la combustion complète de l'unité de quantité de combustible (kg ou Nm³).

II.3-Pouvoir fumigène:

C'est le volume de fumée sèche dégagée (produits de combustion + azote) par la combustion stoechiométrique de l'unité de quantité de combustible.

Il est à remarquer que les combustibles peuvent être solides (charbon ...), liquides (alcools, gasole...) ou gazeux (méthane, butane...). Mais la combustion se fait pratiquement toujours en phase gazeuse après évaporation du combustible sous l'effet de la chaleur dégagée, ou bien après pulvérisation (charbon finement broyé).

Certaines substances comportent et le carburant et le comburant, ce sont généralement des explosifs (au sens banal du terme) ou des propergols pour la propulsion d'engins; comme exemples de ces substances: la nitroglycerine et l'hydrazine.

III) GRANDEURS CARACTERISANT UN MELANGE CARBURANT-COMBURANT-INERTE:

III.1-Limite d'inflammabilité:

La combustion d'un mélange peut avoir lieu tant que la proportion comburant/carburant ne s'éloigne pas trop de la proportion stoechiométrique. Si L est le pourcentage de combustible dans le mélange, la combustion n'est possible que si $L_i < L < L_s$ ce qui définit le domaine d'inflammabilité.

$L < L_i$ pas assez de combustible, le mélange est trop pauvre.
 $L > L_s$ pas assez d'oxygène, le mélange est trop riche.

Le domaine d'inflammabilité varie selon certains paramètres:

. si la température du mélange augmente, le domaine est élargi des deux côtés.

. le domaine s'élargit également pour les fortes pressions; mais au dessous d'une certaine valeur de p , le domaine est réduit à un point car L_i et L_s sont confondues, la combustion est alors impossible.

. Les gaz inertes et les vapeurs d'eau réduisent le domaine; ainsi, le domaine est plus large avec de l'oxygène pur qu'avec de l'air; le domaine est élargi du côté de L_s .

Une autre grandeur est utilisée pour caractériser la teneur du mélange en combustible appelé justement richesse.

$$\varphi = \frac{(\text{Combustible/Comburant})_{\text{vrai}}}{(\text{Combustible/Comburant})_{\text{stoech.}}}$$

$\varphi = 1$, mélange stoechiométrique

$\varphi > 1$, ,, riche

$\varphi < 1$, ,, pauvre

III.2-Température d'inflammation:

Même si le mélange ne sort pas du domaine d'inflammabilité, il est nécessaire, pour déclencher la combustion, de le porter à une température supérieure à une certaine limite dite "température d'inflammation". Une étincelle d'allumage porte une région du mélange à une température supérieure à cette limite déclenchant ainsi la combustion qui se propage par la suite dans le milieu réactionnel; ce type d'allumage est dit localisé.

L'inflammation (ou l'auto-inflammation pour certains auteurs) peut être provoquée dans tout le mélange au même instant en chauffant celui ci jusqu'à la température d'inflammation, l'allumage est alors dit non localisé.

Une certaine quantité d'énergie est nécessaire pour atteindre la température d'inflammation, c'est une caractéristique intrinsèque du milieu réactionnel, elle est minimale pour un mélange stoechiométrique et augmente vite pour les mélanges riches ou pauvres.

Dans le cas de l'allumage localisé par étincelle, le petit volume à chauffer ne doit pas être en dessous d'une valeur limite afin d'assurer la propagation de la combustion; si ce volume est supposé sphérique, on parle alors de "rayon critique d'allumage".

III.3-Limite extrême d'inflammabilité:

Il existe une teneur maximale en gaz inertes (diluants) dans le mélange au dessus de laquelle aucune propagation de la combustion n'est possible quelles que soient les proportions relatives de combustible et d'oxygène: c'est la limite extrême d'inflammabilité.

Le CO₂ des extincteurs dilue le mélange inflammable jusqu'à atteindre cette limite et la dépasser, le rendant ainsi ininflammable.

IV) PROPAGATION DE LA COMBUSTION :

Soit un mélange de combustible et d'air remplissant les conditions le rendant inflammable. On fait jaillir une étincelle assez énergique, un certain temps après s'écoule dit "délai d'auto-inflammation" puis la réaction s'amorce et se propage.

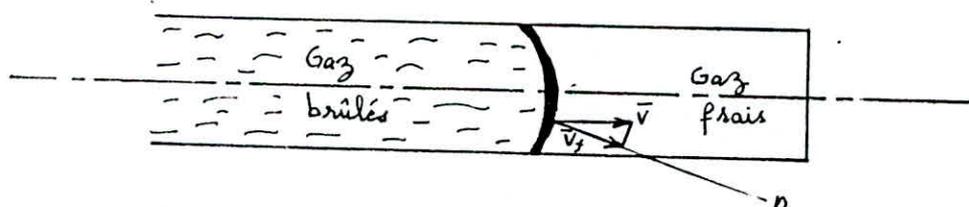
La zone de réaction est caractérisée par une forte émission de lumière: c'est le front de flamme, il se déplace avec une certaine vitesse, c'est la déflagration.

IV.1-Vitesse fondamentale de déflagration:

C'est une caractéristique importante du milieu réactionnel, elle est indépendante de la configuration géométrique du mélange, elle est reliée quantitativement à la vitesse réactionnelle.

Expérimentalement, on la mesure par deux méthodes:

* Méthode du tube:



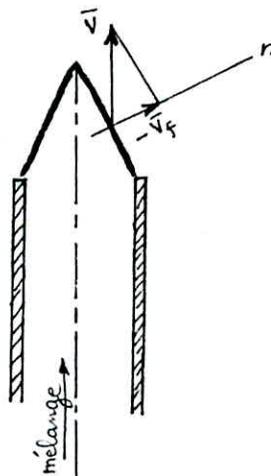
Un tube ouvert d'un côté et fermé de l'autre, contient le mélange inflammable. On déclenche la combustion du côté ouvert et on mesure la vitesse V avec laquelle le front de flamme se déplace, on doit également mesurer l'aire A de celui ci. La vitesse fondamentale de déflagration V_f est donnée par:

$$V_f = V.S/A$$

avec S l'aire de la section droite du tube.

Physiquement V_f représente ainsi une vitesse qui, associée à la surface du front de flamme A , traduit la consommation volumique $V.S$ de mélange frais.

*Méthode du brûleur:



Le mélange inflammable s'écoule dans un tube en régime laminaire, il brûle dès sa sortie de ce tube. La flamme est immobilisée au sommet car la vitesse de propagation du front de flamme est directement opposée à celle d'écoulement du mélange, ce type de flamme est dit "flamme laminaire de prémélange stabilisée". Le front de flamme est de forme proche d'un cône de révolution, sa couleur est généralement bleue.

Si Q est le débit volumique du mélange, et A l'aire du front de flamme, la vitesse fondamentale de propagation est :

$$V_f = Q/A$$

La vitesse fondamentale de déflagration est aussi appelée "vitesse normale de déflagration", car en tout point du front de flamme, la vitesse suivant la direction normale à la surface est justement V_f .

La méthode du brûleur est plus utilisée car elle est proche des conditions industrielles, elle permet également de déterminer les dimensions de la flamme. L'ordre de grandeur de V_f est, en moyenne, de quelques dizaines de cm/s pour les hydrocarbures.

Effets de certains paramètres sur la vitesse V_f :

Pour un mélange proche du stoechiométrique, V_f est maximale, elle décroît au fur et à mesure qu'on s'en écarte. La concentration en diluants diminue V_f et de façon linéaire (pour mélange stoechiométrique). La variation de la température initiale du mélange fait varier V_f dans le même sens. La pression diminue généralement V_f .

IV.2-La détonation:

Pour certaines conditions de pression, de température et de concentration, la combustion déflagrante vue plus haut, évolue en une combustion détonante; la combustion est alors plus brutale et peut devenir destructive. Il a été prouvé expérimentalement qu'une déflagration émet des ondes de pression vers les gaz frais, qui deviennent de plus en plus fortes avec la propagation du front de flamme; (chaque onde réchauffe un peu plus le mélange en le comprimant adiabatiquement, et par conséquent l'onde qui la suivra sera plus rapide: en effet la célérité de l'onde est $\sqrt{\gamma r.T}$ qui est une fonction croissante de la température.) Ces ondes vont se rattraper pour constituer une onde de choc supersonique; celle ci provoque une autoinflammation des gaz à son passage car elle les comprime assez fortement pour atteindre la température d'auto-inflammation; l'onde de choc et le front de flamme sont alors confondus: c'est la détonation. Dans certains cas, c'est le front de flamme qui s'accélère pour atteindre l'onde de choc.

Le domaine de concentration où la détonation est possible est dit "limite de détonabilité" qui est inclus dans le domaine d'inflammabilité vue précédemment.

Enfin, les substances dites "explosives" dans le langage courant, sont plutôt des détonants car leur combustion est détonante; dans le langage technique, un mélange explosif est synonyme d'un mélange déflagrant pour la plupart des auteurs.

V) LA COMBUSTION VUE SOUS SON ASPECT CHIMIQUE:

La combustion est avant tout une réaction chimique; l'analyse de ses mécanismes réactionnels est de première importance pour comprendre ce phénomène complexe et compliqué à la fois.

Une discipline importante étudie la combustion, c'est la cinétique chimique; les meilleurs progrès sont faits pour le cas de la combustion en phase gazeuse.

La combustion vive est la conséquence de l'emballement d'une réaction chimique exothermique, contrôlée par certains phénomènes physiques (transfert thermique, transfert de masse).

La combustion est pilotée par des espèces chimiques intermédiaires entre les réactifs et les produits, ce sont des radicaux (atomes ou groupe d'atomes) présentant des électrons de valences par exemple CH, OH.

La combustion se fait par une série de réactions chimiques élémentaires dont le nombre est très élevé même pour les réactions les plus simples; ils sont peu connus. Certaines de ces réactions mettent en jeu les radicaux libres, doués d'une grande réactivité, pour attaquer les réactifs. Elles sont classées en deux types:

-Réaction de propagation:

un des réactifs + un radical ----> un des produits +
un autre radical.

-Réaction de ramification:

un des réactifs + un radical -----> plusieurs radicaux

C'est une réaction qui génère seulement des radicaux et en grand nombre, ces derniers déclencheront d'autres réactions: c'est la réaction en chaîne, elle explique l'emballement d'une réaction de combustion.

Les radicaux libres font propager le front de flamme en diffusant dans le mélange frais. Une fraction de ces radicaux est captée par les parois de l'enceinte (dans le cas d'une flamme confinée) qui comportent des atomes ionisés; une autre fraction se recombine et donne des corps stables (réactifs ou produits finaux de la combustion) en dégageant de la chaleur qui doit être captée par des molécules voisines, en particulier ceux des parois relativement froides.

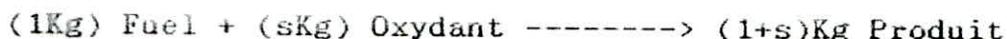
Pour que la propagation se poursuive, il faut que le bilan des radicaux produits et des radicaux perdus soit positif, ceci explique le phénomène de coincement des flammes: Lorsque la combustion se fait dans une enceinte étroite, par exemple entre deux plaques très rapprochées ou dans un tube de faible diamètre, les parois captent un grand nombre de radicaux ce qui entrave la propagation et conduit à l'extinction de la flamme. Lorsqu'on jette du sable sur un feu et qu'il s'éteint, c'est grâce au phénomène de coincement que cela arrive, car les grains de sable craient entre eux des espaces assez étroits pour réaliser le coincement des flammes.

Dans le cas de l'allumage par étincelle, les radicaux initiaux sont produits par crackage des réactifs suite à leur échauffement. Pour l'allumage par flamme (veilleuse, allumette), en plus du crackage, il y a apport en radicaux propres à la flamme d'allumage, ce qui fait qu'une flamme allume plus facilement un mélange inflammable.

VI) VITESSE DE REACTION:

C'est une grandeur qui mesure le taux de disparition d'un réactif, ou le taux de production de l'un des produits par unité de temps.

Soit la réaction suivante:



s est le rapport massique O/F du mélange stoechiométrique

Si Y_f et Y_o sont les fractions massiques dans le mélange du combustible et de l'oxydant, et si le mélange est à une température T , le taux de consommation instantané du combustible \dot{W}_f est donné par l'expression:

$$\dot{W}_f = A \cdot T^\alpha \cdot Y_f \cdot Y_o / (M_f \cdot M_o) \cdot \text{EXP}(-E/RT) \quad \langle \text{Kg/m}^3/\text{sec} \rangle$$

avec A, α : constantes dépendants du couple fuel-oxydant
 M_f, M_o : masses molaire du fuel et de l'oxydant
 E : énergie d'activation du couple f-o
 R : constante des gaz parfaits

Le terme $\text{EXP}(-E/Rt)$ dit terme d'Arrhénius, désigne la probabilité, lorsque le mélange est à une température T , pour qu'une molécule possède l'énergie E lui permettant d'entrer en réaction; ce qui revient à dire que c'est la fraction de molécules aptes à entrer en réaction pour une température T du mélange.

L'expression de \dot{W}_f n'est valable que pour une certaine plage de température; en effet cette équation suggère que la vitesse de réaction croît indéfiniment avec la température or l'expérience montre que pour des températures élevées il apparaît des réactions intermédiaires qui ont tendance à ralentir la réaction globale, celle-ci peut même changer de nature.

On sait également que la réaction ne peut se réaliser audessous de la température d'autoinflammation.

De même, les valeurs de Y_f et Y_o doivent être telles que la richesse du mélange soit comprise dans le domaine d'inflamabilité défini plus haut.

Le taux de disparition de l'oxydant \dot{W}_o peut être déduit connaissant s ,

$$\dot{W}_o = s \cdot \dot{W}_f$$

On peut également déduire le taux de production de chaleur \dot{Q} ; soit ΔH° la chaleur de réaction (en valeur absolue),

$$\dot{Q} = \Delta H^\circ \cdot \dot{W}_f \quad \langle \text{KJ/m}^3/\text{sec} \rangle$$

CHAPITRE 2

LES FLAMMES
APPROCHE QUALITATIVE

I) INTRODUCTION

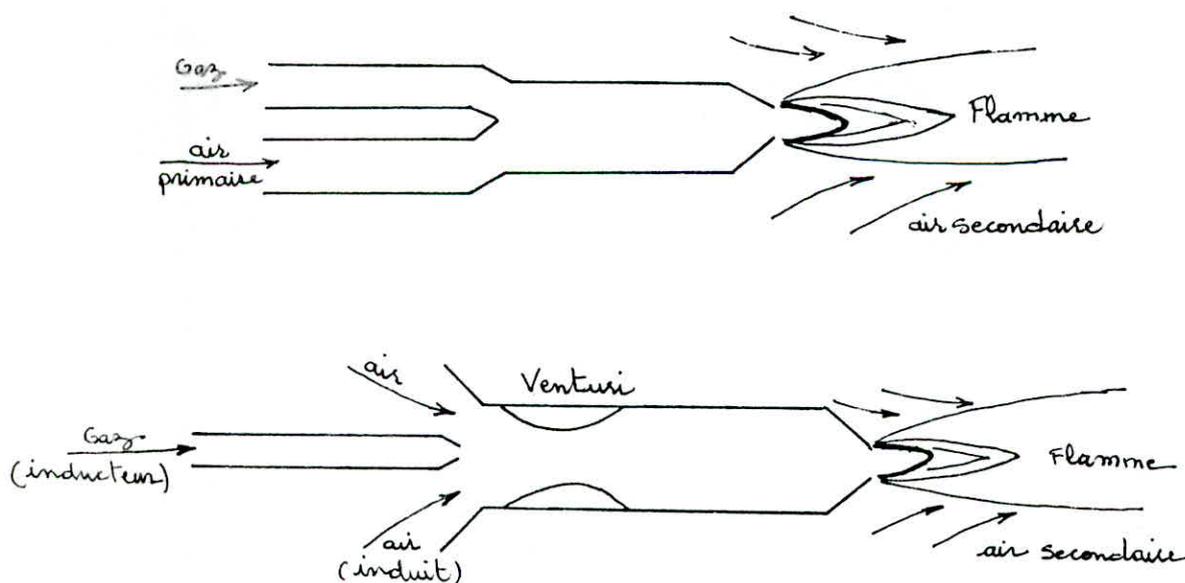
Une flamme naît en général de la rencontre d'un combustible et d'un oxydant qui entrent en réaction, avec des conditions hydrodynamiques données. Certaines réactions chimiques donnent naissance à des flammes sans qu'elles soient des réactions de combustion (ex: Fluore + hydrogène ; hydrocarbures + halogènes).

Selon que les deux réactifs sont mélangés ou séparés avant la réalisation de la réaction, on distingue entre les flammes à prémélange et les flammes de diffusion.

II) FLAMMES A PREMELANGE:

Réalisables seulement avec des combustibles gazeux; dites également flammes aérées. Le mélange peut être riche, pauvre ou stoechiométrique. En général, le gaz combustible est mélangé préalablement à une fraction de l'air nécessaire à sa combustion dit 'air primaire' le reste du comburant est emprunté à l'atmosphère au cours de la combustion. On définit le 'taux d'aération primaire' n par le rapport (air primaire/air théorique).

Comme exemples de ces flammes, la flamme d'un chalumeau ($n \approx 1$) ou flammes d'un four de cuisine ($n < 1$).



L'inconvénient des flammes à prémélanges est qu'elles présentent le risque de 'retour de flamme' ce qui les rend dangereuses dans les applications industrielles. Cette situation se produit lorsque la vitesse de sortie du mélange devient assez inférieure à la vitesse à laquelle celui-ci est consommé; si par contre la vitesse de sortie est très élevée, la flamme risque alors de s'écarter de la tête du brûleur (flamme suspendue) et pourrait s'éteindre (flamme soufflée).

Pour parer au risque de retour de flamme, on met à profit le phénomène de coincement vu au chapitre précédent: les diamètres des orifices sont pris assez petits pour 'coincer' les flammes en cas où elles remontent le courant. Pour un gaz combustible donné et pour un taux d'aération n , il existe un diamètre limite des orifices de sortie tel qu'en dessous de cette limite, le retour de flamme est impossible, ceci en vertu du phénomène de coincement.

Par conséquent, le diamètre de l'orifice d'un brûleur de gaz prémélangés doit être une constante, et si le besoin nécessite un débit calorifique plus important, c'est le nombre de trous qu'il faut multiplier plutôt que d'augmenter le diamètre.

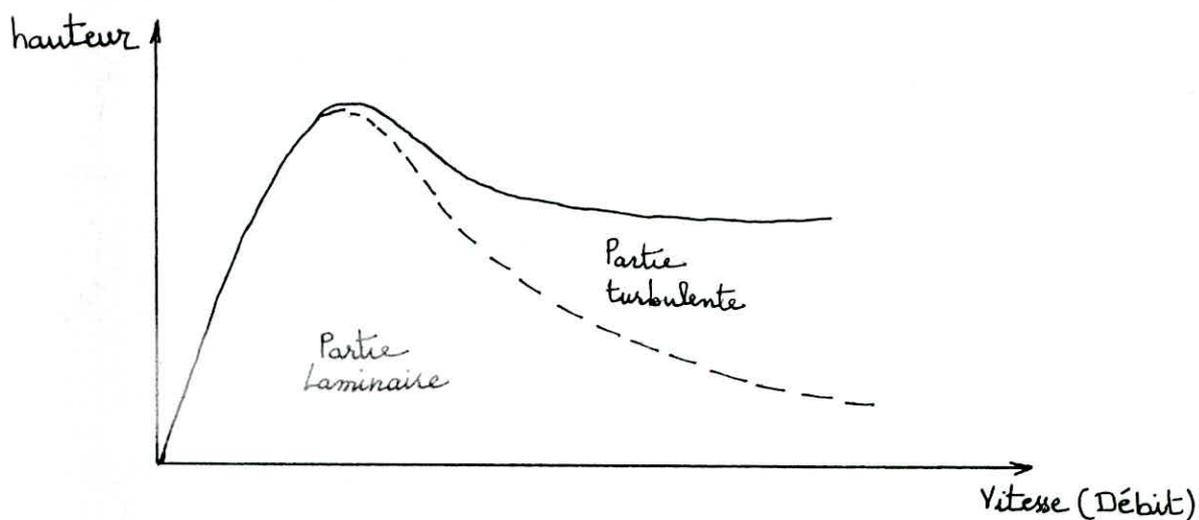
III) FLAMMES DE DIFFUSION:

Réalisable avec toutes les catégories de combustibles, c'est le mode qu'utilise l'industrie pour la production de chaleur. On peut la considérer comme étant la flamme pour laquelle le taux d'aération n est nul; les deux réactifs se rencontrent dans la zone de réaction par inter-diffusion. Le risque de retour de flamme est impossible. L'exemple le plus simple de ce type de flamme est la flamme d'un briquet. Si la flamme se trouve dans une enceinte, elle est dite confinée.

La vitesse de propagation des flammes de diffusion est gouvernée principalement par le phénomène d'inter-diffusion des réactifs; c'est un phénomène assez long et se traduit par des flammes longues comparées à celles de prémélange ainsi que par un épaississement du front de flamme; de même, cette difficulté de rencontre des deux réactifs occasionne souvent des réactions incomplètes. Pour la même raison encore, la flamme de diffusion est plus délicate à stabiliser. Pour les gaz facilement décollables cas du méthane, les brûleurs sont conçus pour aérer faiblement le combustible et ainsi,

améliorer la stabilité des flammes.

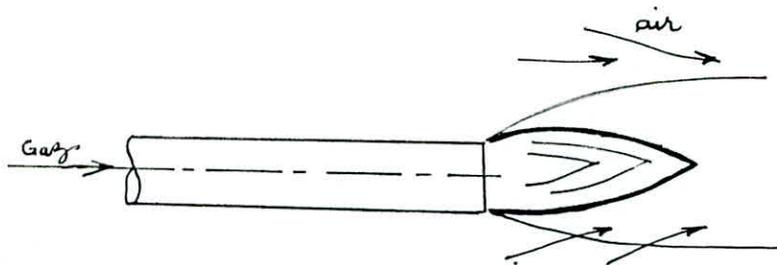
L'inter-diffusion des réactifs dépend beaucoup de la nature de l'écoulement au sein de la flamme; si celui-ci est laminaire, la diffusion est dite moléculaire, s'il est turbulent, elle est dite turbulente. Les turbulences accélèrent la diffusion et rendent les flammes plus courtes comme le montre le graphe ci dessous.



* Brûleurs à flammes de diffusion:

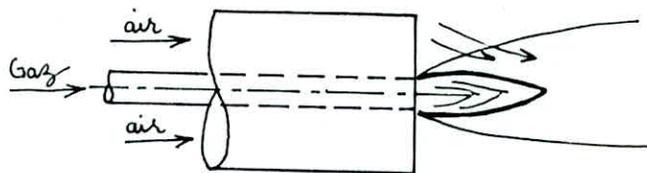
Les deux fluides peuvent être manipulés indépendamment ce qui permet d'adapter le déroulement de la combustion à la configuration du foyer. Ils sont très simples mais nécessitent une régulation afin d'asservir les deux débits entre eux pour contrôler la qualité de la combustion.

- Le gaz seul est animé de vitesse:



Elle est totalement abandonnée dans l'industrie

- Les jets d'air et de gaz ont des vitesses parallèles:



C'est le cas le plus fréquent dans l'industrie, avec des écoulements coaxiaux.

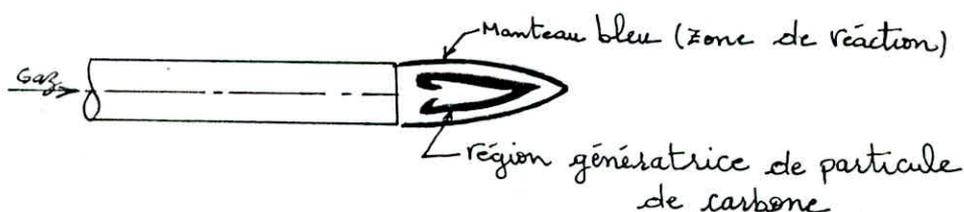
- Les deux jets ont des vitesses de directions différentes:

Présente l'avantage de réaliser le mélange plus rapidement.

Lorsque le combustible est un liquide, le brûleur doit jouer le rôle de pulvérisateur d'où des configurations plus complexes que celles schématisées plus haut.

L'intérêt d'une flamme de diffusion laminaire se limite en général à l'éclairage (bougies, lampes à pétrole...); par contre les flammes de diffusion confinées en régime turbulent sont à la base des brûleurs industriels et des installations de chauffage (Les turbulences sont provoquées par des vitesses élevées et par la configuration de l'injecteur qui imprime au carburant un écoulement tourbillonnaire).

* Constatations expérimentales:



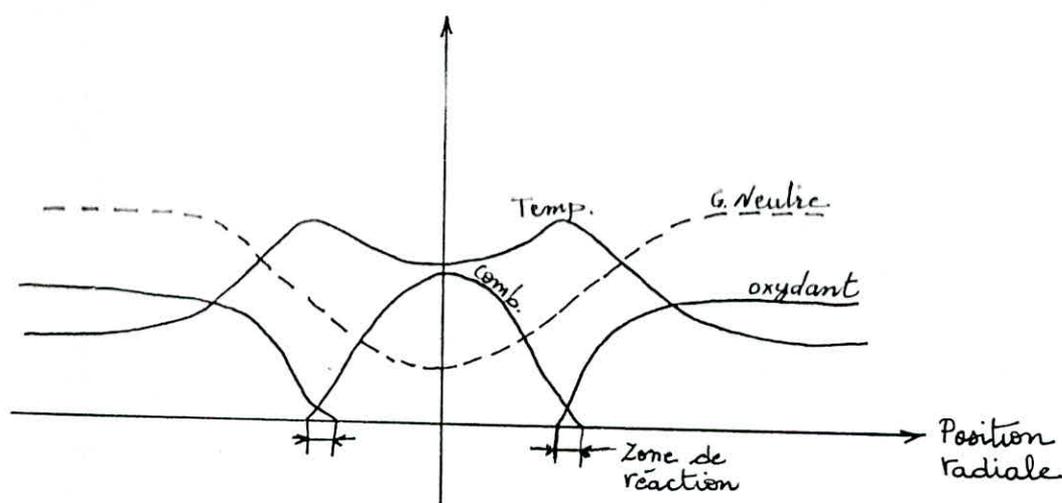
La flamme est entourée d'un manteau bleuâtre ou a lieu le contact combustible-comburant et par suite, la combustion: ce manteau constitue le front de flamme. A l'intérieur de ce manteau, où l'air ne diffuse pas suffisamment, ont lieu des combustions incomplètes avec formation de particules de carbone (si le combustible est un hydrocarbure) qui, portées à haute température deviennent incandescentes et rendent la flamme éclairante (ce carbone peut se déposer si on rapproche de la flamme une paroi froide).

La longueur d'une flamme de diffusion dépend seulement du débit de combustible, et pour obtenir des flammes courtes avec un brûleur à grand débit, il faut fractionner ce débit en plusieurs.

A noter que la multiplication des trous se fait pour les brûleurs à flamme de diffusion ainsi que pour ceux à flammes de prémélange, mais pour des raisons totalement différentes (sauf peut être la répartition de la chaleur dans les foyers).

L'objet de ce travail est donc de calculer les profils des grandeurs physiques intervenant dans une flamme de diffusion. Pour juger plus tard, de la qualité des résultats, il est nécessaire d'exposer ci après, ce que l'étude expérimentale nous apprend sur le sujet.

Les courbes ci dessous, représentent les profils typiques des grandeurs considérées, d'une flamme de diffusion axisymétrique; mesurées à une certaine distance de l'orifice <11>, 207



Le front de flamme (zone de réaction) se situe là où les réactifs se rencontrent, on voit qu'ils y coexistent (en quantité très faibles) sur une certaine largeur dans la direction radiale, celle-ci constitue l'épaisseur du front de flamme (quelques centièmes de millimètre). Plus la vitesse de réaction est élevée, plus le front de flamme s'amincit; ainsi pour la flamme de l'hydrogène avec l'oxygène pur, la zone de réaction est si étroite que le front de flamme se réduit pratiquement à une surface.

La concentration en produit de réaction est maximale dans la zone de réaction, le profil des températures a le même aspect que celui des produits.

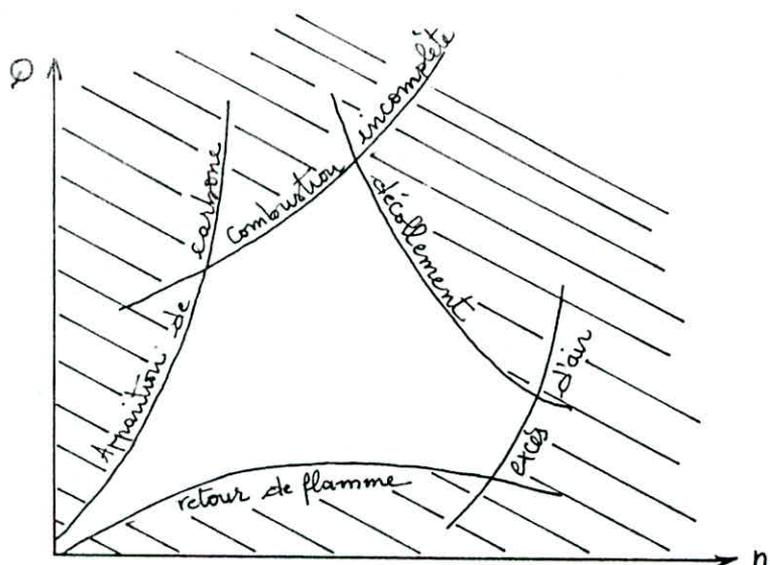
Le profil du gaz inerte est plus régulier et ne présente pas de variation brutale; ceci s'explique par le fait qu'il n'intervient pas dans la combustion, et donc diffuse dans le mélange tout en ignorant la réaction chimique.

A noter que pour n'importe quelle position radiale, la somme des concentrations des différentes espèces (carburant, comburant, diluant, produits) est égale à l'unité; par conséquent, il suffit de connaître trois des concentrations pour déduire la quatrième.

IV) DIAGRAMME DE FONCTIONNEMENT D'UN BRULEUR

C'est un diagramme à partir duquel on détermine les conditions de bon fonctionnement du brûleur i.e meilleure combustion.

Il porte en abscisse le taux d'aération n , et en ordonnée le débit calorifique Q .



Un brûleur fonctionne normalement à l'intérieur de la zone non hachurée.

En se référant à la courbe " Combustion incomplète", on voit que pour un débit Q donné, il existe une valeur minimale du taux d'aération n en dessous de laquelle la combustion est incomplète, la flamme présente alors une pointe jaune; cette valeur de n est dite dans l'industrie 'indice de pointe jaune'.

A remarquer que lorsque le taux d'aération n est nul, ce qui signifie qu'il s'agit de flammes de diffusion, la marge de bon fonctionnement du brûleur est très étroite.

V) RAYONNEMENT ET EMISSION DE LUMIERE DANS LES FLAMMES:

Le front de flamme émet beaucoup plus de rayonnement que peuvent le prévoir les lois du rayonnement thermique, souvent à des longueurs d'ondes courtes (visible et ultraviolet). Ceci dit que l'émission de lumière dans les flammes n'est pas due à l'effet thermique, qui consiste à transformer une partie de l'énergie de vibration des molécules en ondes électromagnétiques.

Le phénomène responsable de cette émission est dit 'chimiluminescence' qui s'explique ainsi: Certains radicaux comme CH , OH , C_2 , HCO ... conservent la chaleur de réaction sous forme d'énergie d'excitation au niveau de leurs électrons, ceux ci en revenant à leurs états initiaux libèrent leur énergie sous forme de lumière ou de rayonnement

ultraviolet.

Certaines réactions chimiques, qui ne sont pas des réactions de combustion donnent naissance à des flammes dont la température ne dépasse pas 400 °C ; pour la circonstance, elles sont appelées 'flammes froides'. Ce type de réaction met en évidence de façon claire le phénomène de chimiluminescence.

Pour une flamme à prémélange, les pertes par rayonnement peuvent atteindre 18% de la chaleur de réaction, la quasi totalité dans la gamme infrarouge, et seulement 0,4 % dans la gamme visible et ultra-violet. Lorsque la flamme génère des particules de carbone ce qui est souvent le cas pour la flamme de diffusion, la part de rayonnement dans le visible est accrue.<11>.

La présence de particules solides dans la flamme, modifie grandement ses caractéristiques radiatives. Ceux ci dépendront fortement de la concentration, des dimensions et des propriétés physiques des particules. Ces particules solides sont généralement constituées de carbone ou d'oxydes métalliques.

VI) EFFET DE LA PRESSION SUR LES FLAMMES :

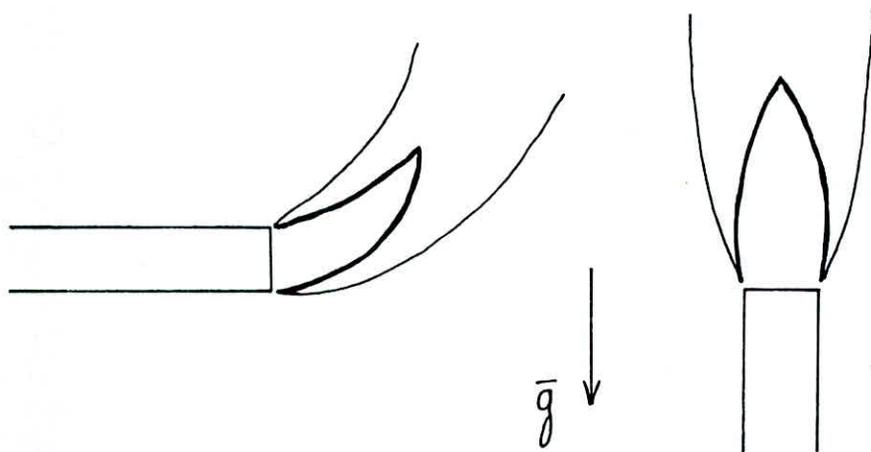
Il est prouvé que la vitesse de diffusion V_d d'un gaz est proportionnelle au libre parcours moyen; par contre la vitesse de déflagration V_c lui est inversement proportionnelle. Ainsi lorsque la pression décroît, il est clair que le libre parcours moyen augmente et donc V_d croît et V_c décroît. Aux basses pressions, la vitesse de diffusion est si élevée et celle de combustion relativement basse, que pour une flamme de diffusion, la réaction devient contrôlée par la vitesse de réaction, comme pour une flamme à prémélange. La distinction entre les deux types de flammes devient alors imprécise.

La pression a également l'effet de réduire l'épaisseur du front de flamme.

VII) EFFET DE LA GRAVITE SUR LES FLAMMES.

30

Les gaz chauds, plus légers que l'air environnant, s'élèvent sous l'effet de la poussée d'Archimède et créent un courant ascendant autour de la flamme. Ces courants allongent la flamme et améliorent son alimentation en oxygène; ils sont de première importance pour entretenir les flammes des briquets et des lampes à pétrole. L'expérience a montré que les flammes de diffusions en apesanteur s'éteignent du fait qu'il n'y a pas de courants de convection.



CHAPITRE 3

MODELE MATHEMATIQUE DE
LA FLAMME DE DIFFUSION LAMINAIRE
AXISYMETRIQUE

I) DEDUCTION DU MODELE COMPTE TENU DES HYPOTHESES:

La flamme de diffusion laminaire (FDL) met en jeu les trois phénomènes de transports connues à savoir , transport de quantité de mouvement, de masse et d'énergie. Le système d'équations de la FDL sera donc composé des équations régissant ces trois phénomènes ajoutées de l'équation de conservation de masse.

Les hypothèses les plus légitimes à faire sont: le mélange gazeux est un fluide Newtonien et la combustion se déroule dans des conditions isobares.

Les paramètres physiques viscosité dynamique μ , coefficients de diffusions D_i , conductibilité thermique λ et la chaleur spécifique C_p , sont constants. Ces dernières hypothèses sont plus discutables; On sait que ces quatre grandeurs croient avec la température, en particulier les trois premières; par exemple, à 1100 °C, μ est trois fois plus élevée qu'à 25 °C, et λ quatre fois plus. Mais pour des raisons de simplifications i.e pour réduire les difficultés sur le plan numérique, ces hypothèses sont maintenues même dans des publications très récentes.

L'hypothèse qui nous écartera le plus de la réalité, mais qui nous simplifiera davantage le problème numérique est que nous supposerons le milieu inextensible avec une masse volumique indépendante de la composition du mélange; en d'autres termes, la masse volumique est considérée comme constante en tout point. Ceci est évidemment incompatible avec la réalité.

Compte tenu de toutes ces hypothèses, Le système d'équation de la FDL s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla \bar{U} = \nu \cdot \nabla^2 \bar{U} + F \quad ; \quad \nu = \frac{\mu}{\rho} \\ \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla Y_i = D_i \cdot \nabla^2 Y_i + \frac{1}{\rho} \cdot \dot{W}_i \quad ; \quad i = 1 \dots N-1 \\ \frac{\partial T}{\partial t} + \bar{U} \cdot \nabla T = a \cdot \nabla^2 T + \frac{1}{\rho C_p} \cdot \dot{Q} \quad ; \quad a = \frac{\lambda}{\rho C_p} \\ \text{Div} \bar{U} = 0 \\ \sum_{i=1}^N Y_i = 1 \end{array} \right.$$

avec : \vec{U} le vecteur vitesse
 T la température
 Y_i la concentration massique de l'espèce i
 N nombre total d'espèces chimique en présence

Les termes F , \dot{W}_i , \dot{Q} sont dit 'termes sources' ils traduisent respectivement la production (ou la disparition) de la quantité de mouvement, de l'espèce i et de l'énergie.

Dans notre cas, on négligera l'effet de la gravité, ainsi F sera pris nul. \dot{W}_i est nul seulement si l'espèce i n'intervient pas dans la réaction chimique. On négligera également de façon légitime l'échauffement dû aux pertes visqueuses, mais de façon plus discutable les pertes par rayonnement; ainsi, \dot{Q} traduira la production de chaleur suite à la réaction chimique.

II) FORME FINALE DU SYSTEME D'EQUATIONS

Pour terminer, on fera l'hypothèse de couche limite pour le jet en atmosphère libre, ainsi on n'écrira l'équation de mouvement que dans la direction privilégiée de l'écoulement, à savoir la direction axiale; de même, on rejètera les termes de second ordre de petitesse dans les équations <18>.

La réaction chimique est du type décrit dans VI du chapitre 1.

Sachant que notre système physique présente une configuration axisymétrique, les équations se mettent alors sous leurs formes définitives suivantes:

$$\begin{aligned}
 (1) \quad \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} &= \nu \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \\
 (2) \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} &= 0 \\
 (3) \quad \frac{\partial Y_F}{\partial t} + u \frac{\partial Y_F}{\partial x} + v \frac{\partial Y_F}{\partial r} &= D_f \left\{ \frac{\partial^2 Y_F}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_F}{\partial r} \right\} - \frac{1}{\rho} \dot{W}_F \\
 (4) \quad \frac{\partial Y_O}{\partial t} + u \frac{\partial Y_O}{\partial x} + v \frac{\partial Y_O}{\partial r} &= D_o \left\{ \frac{\partial^2 Y_O}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_O}{\partial r} \right\} - \frac{s}{\rho} \dot{W}_F \\
 (5) \quad \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial r} &= a \left\{ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right\} + \frac{\Delta H^\circ}{\rho c_p} \dot{W}_F
 \end{aligned}$$

$$(6) \frac{\partial Y_n}{\partial t} + u \frac{\partial Y_n}{\partial x} + v \frac{\partial Y_n}{\partial r} = D_n \left\{ \frac{\partial^2 Y_n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_n}{\partial r} \right\}$$

$$(7) Y_p = 1 - Y_f - Y_o - Y_n$$

x et r sont respectivement les coordonnées axiale et radiale
u et v " " les vitesses axiale et radiale.
Les indices f, o, n, p, désignent respectivement le
combustible, l'oxydant, le gaz neutre et les produits.
Pour l'expression de \dot{W}_f , revenir au VI, chapitre 1.

Remarques:

Le terme $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ est d'habitude négligé en théorie de
couche limite, mais la méthode de calcul qui sera exposée
dans le chapitre suivant, a permis de le garder dans
l'équation.

Les dérivées dans le temps qui figurent dans les
équations ne signifient pas qu'une flamme est toujours en
régime transitoire (bien au contraire celle ci atteint très
vite son régime établi), c'est la méthode d'intégration
numérique, basé sur le calcul du régime transitoire, qui en
tient compte.

III) CAS D'UNE REACTION INFINIMENT RAPIDE

Les premières études sur flamme de diffusion font
l'hypothèse d'une combustion infiniment rapide, ce qui
signifie que le combustible et le comburant ne peuvent
coexister et le front de flamme ou la zone de réaction se
réduit à une surface (voir III du chap.2).

Le terme source \dot{W}_f a alors une valeur infinie et il faut
l'éliminer entre les équations de transport de masse et
l'équation de l'énergie. Pour ce faire, on suposera les Lewis
égaux à l'unité i.e les rapports des coefficients de diffusion
 D_f et D_o à la diffusivité thermique $\lambda / \rho C_p$ sont égaux à 1.
Cette hypothèse est raisonnable pour beaucoup de gaz.

La transformation de Schwab et Zeldovitch <21> consiste
à introduire une variable f pour réunir les équations
3, 4 et 5 en une seule; cette variable est dite 'variable de
mélange' et est définie comme suit:

$$f = \frac{Y_F - Y_o/s + Y_{ow}/s}{1 + Y_{ow}/s} = \frac{h - h_\infty}{h_o - h_\infty} \quad (1')$$

avec h , l'enthalpie du mélange : $h = C_p \cdot T + Y_f \cdot \Delta H^\circ$

h_∞ l'enthalpie très loin de la flamme : $C_p T_\infty + Y_{F_\infty} \cdot \Delta H^\circ$

h_o l'enthalpie juste à la sortie de l'orifice : $C_p T_o + Y_{F_o} \cdot \Delta H^\circ$

A noter que $Y_{F_\infty} = 0$ et $Y_{F_o} = 1$

Le système d'équation se réduit alors à :

$$\text{II} \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} = \nu \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial r} = D \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right\} ; D = \frac{\lambda}{\rho C_p} = D_f = D_o : Le(s) = 1 \\ \frac{\partial Y_n}{\partial t} + u \frac{\partial Y_n}{\partial x} + v \frac{\partial Y_n}{\partial r} = D_n \left\{ \frac{\partial^2 Y_n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_n}{\partial r} \right\} \\ Y_p = 1 - Y_F - Y_o - Y_n \end{array} \right.$$

Connaissant f , on peut à partir de (1') déduire les températures T et les concentrations Y_o et Y_f . Le calcul de ces deux dernières se fait en suivant le raisonnement suivant :

Le front de flamme est l'endroit où les réactifs réagissent en proportions stoechiométriques i.e $Y_f = Y_o/s$; la variable f prend alors la valeur

$$f_{stoe} = \frac{Y_{ow}/s}{1 + Y_{ow}/s}$$

Et comme l'oxydant et le combustible ne coexistent pas, à l'extérieur du front de flamme $Y_f = 0$, l'expression de f nous permet alors de tirer Y_o . A l'intérieur du front $Y_o = 0$, ce qui permet de tirer Y_f .

IV) ETAPES A SUIVRE POUR L'INTEGRATION

Les systèmes I et II sont composés d'équations de type paraboliques. L'équation de mouvement et de conservation de masse constituent un sous-système pouvant être résolu indépendamment des autres équations: c'est une conséquence directe de l'hypothèse d'un fluide à masse volumique constante.

L'intégration du système I se fera par les étapes suivantes:

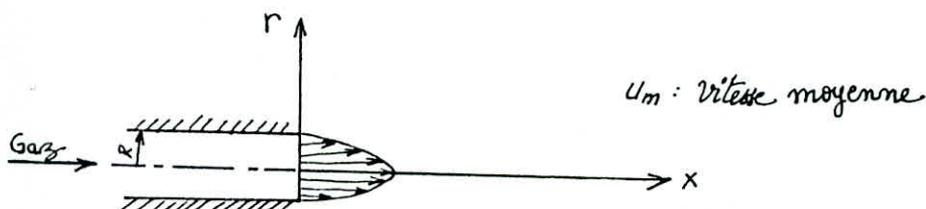
- 1°- Détermination des vitesses à partir des deux premières équations de I.
- 2°- Intégration de l'équation en f du système II, pour en tirer les distributions de Y_f , Y_o , et T comme premières approximations.
- 3°- Intégration du sous-système de I formé des équations de transport du fuel et de l'oxydant et de l'équation de l'énergie. Les conditions initiales seront les résultats de l'étape 2°.
- 4°- Intégration de l'équation restante pour trouver la distribution de Y_n .
- 5°- Calcul de Y_p à partir de l'équation algébrique.

V) CONDITIONS AUX LIMES & INITIALES

Le système d'équations I (ou II) décrit une grande variété de flammes de diffusion axisymétriques. Ce qui les distinguera entre elles sont les conditions aux limites.

Le type de FDL qui intéresse notre étude est celle non confinée; dans la pratique on peut rencontrer deux cas:

- * Le gaz combustible sort d'un orifice et brûle avec l'oxydant présent dans l'atmosphère.



Les conditions aux limites sont alors:

- Vitesses:

$$x=0 \text{ et } r < R \text{ -----} \rangle, u = \frac{\Delta P}{L} \cdot \frac{1}{4\mu} (R^2 - r^2).$$

$$v=0 \quad \frac{\Delta P}{L} = \frac{64}{Re} \cdot \frac{u_m^2}{2D} \cdot f = \frac{8}{Re^2} \cdot \mu \cdot u_m$$

$$x=0 \text{ et } r > R \text{ -----} \rangle, u=v=0$$

$$r=0 \text{ -----} \rangle, \frac{\partial u}{\partial r} = 0, v=0$$

$$x \rightarrow \infty \text{ ou } r \rightarrow \infty \text{ ----} \rangle, \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \frac{\partial u}{\partial r} = 0$$

- Concentrations:

$$x=0 \text{ et } r < R \text{ -----} \rangle, Y_f=1$$

$$Y_o=Y_n=0$$

$$x=0 \text{ et } r > R \text{ -----} \rangle, Y_o=0,232 ; Y_n=0,768 \text{ (cas de l'air)}$$

$$Y_f=0$$

$$r=0 \text{ -----} \rangle, \frac{\partial Y_f}{\partial r} = \frac{\partial Y_o}{\partial r} = \frac{\partial Y_n}{\partial r} = 0$$

$$x \rightarrow \infty \text{ ou } r \rightarrow \infty \text{ ----} \rangle, \frac{\partial Y_f}{\partial x} = \frac{\partial Y_o}{\partial x} = 0 ; \frac{\partial Y_o}{\partial r} = \frac{\partial Y_n}{\partial r} = 0 ; \frac{\partial Y_n}{\partial x} = \frac{\partial Y_f}{\partial x} = 0$$

- Température:

$$x=0 \text{ et } r < R \text{ -----} \rangle, T=T_f \text{ (temp. du fuel sortant)}$$

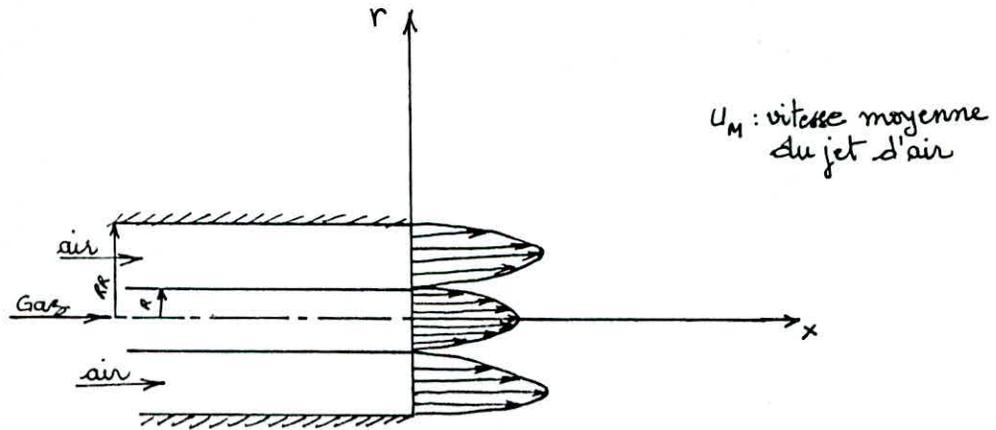
$$x=0 \text{ et } r > R \text{ -----} \rangle, T=T_m \text{ (temp. du milieu ambiant)}$$

pour simplifier, $T_f=T_m=T_o$.

$$r=0 \text{ -----} \rangle, \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

$$x \rightarrow \infty \text{ ou } r \rightarrow \infty \text{ ----} \rangle, \frac{\partial T}{\partial x} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

* Le combustible et l'oxydant proviennent de deux jets coaxiaux.



Les modifications des conditions aux limites sont:

- vitesse:

$$x=0 \text{ et } RR > r > R \text{ ---->, } u = \frac{\Delta P}{L} \cdot \frac{1}{4\mu} \left\{ RR^2 - r^2 + \frac{RR^2 - R^2}{\ln(RR/R)} \cdot \ln \frac{r}{RR} \right\}$$

$$\frac{\Delta P}{L} = \frac{64}{Re} \cdot \frac{1}{D_w} \cdot \frac{v^2}{2g} = \frac{64}{Re} \cdot \frac{1}{2(RR-R)} \cdot \frac{v^2}{2g} = \frac{8\mu U_M}{(RR-R)^2}$$

Les autres C.L restent inchangées.

A noter que pour ce deuxième cas, les C.L sur les concentrations et la température en ($x=0$ et $r>R$) sont mieux vérifiées.

Nota:

Les C.L pour la fonction de mélange f du système II sont comme suit (pour les deux cas):

$$x=0 \text{ et } r < R \text{ ----->, } f=1$$

$$x=0 \text{ et } r > R \text{ ----->, } f=0$$

$$r=0 \text{ ----->, } \frac{\partial f}{\partial r} = 0$$

$$x \rightarrow \infty \text{ ou } r \rightarrow \infty \text{ ---->, } \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r} = 0$$

Les conditions initiales selon les étapes sont: (pour les deux cas)

- à $t=0$ sec,
- 1°- $u=v=0 \quad \forall x, \forall r$ dans le domaine d'integ.
 - 2°- $f=0 \quad \forall x, \forall r$ " " "
 - 3°- Y_f, Y_o, T , résultats de 2°
 - 4°- $Y_n=0,768 \quad \forall x, \forall r$ dans le domaine d'integ.

CHAPITRE 4

INTEGRATION NUMERIQUE

I) INTRODUCTION

La particularité de notre système physique est qu'il ne comporte pas de frontières sur tous les côtés pouvant délimiter de façon naturelle le domaine d'intégration. Il est cependant nécessaire de se fixer un.

Les dimensions axiale et radiale du domaine doivent être prises assez grandes pour que les conditions aux limites de type différentiel (voir chap.3) soient vérifiées suffisamment.

Dans notre exemple, la longueur (axialement) est fixée à 12 fois le rayon de l'orifice, la largeur (radialement) à 6 fois le rayon. (ie rayon de l'orifice du jet de fuel)

La technique d'intégration numérique est celle des différences finis. L'état du système en régime stationnaire sera déterminé en intégrant les équations pas à pas dans le temps jusqu'à atteindre ce régime: c'est la méthode de stationnarisation. <12>, <17>.

II) CALCUL DES VITESSES

Les équations à intégrer sont:

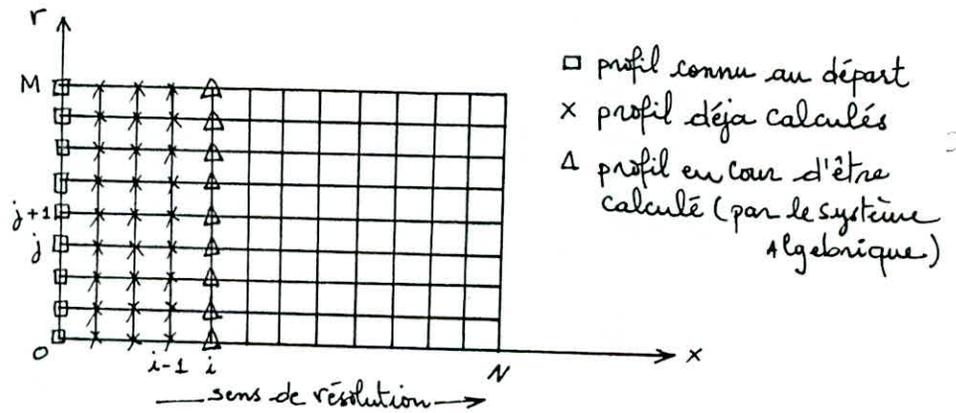
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} = \nu \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} = 0 \end{array} \right.$$

avec les conditions aux limites et initiales vues au chapitre 3. Les idées clefs de la méthode de discretisation sont:

- pour l'équation de mouvement:

- 1°- toutes les dérivées seront approximées par des différences centrales, sauf la dérivée dans le temps;
- 2°- tous les termes non linéaires (termes de convection) ainsi que le terme $\partial^2 u / \partial x^2$ seront approximés par des différences centrales explicites;

L'équation de mouvement se traduit alors par un système algébrique linéaire, qui à chaque résolution nous donne le profil des vitesses sur la $(i+1)$ ième rangée à l'instant $(k+1) \cdot \Delta t$; Le profile en i étant connu, ainsi que tous les profils à l'instant $k \Delta t$ qu'ils soient de u ou de v .



Le système obtenu est de la forme

$$i=1 \dots N \left\{ \begin{array}{l} -A_j M_{i,j+1}^{k+1} + B \cdot M_{i,j}^{k+1} - C_j M_{i,j-1}^{k+1} = K_{i,j}^k \quad j=1, \dots, M-1 \\ -\frac{2j}{\Delta r^2} \cdot M_{i,1}^{k+1} + B \cdot M_{i,0}^{k+1} = K_{i,0}^k \\ B \cdot M_{i,M}^{k+1} - \frac{2j}{\Delta r^2} \cdot M_{i,M-1}^{k+1} = K_{i,M}^k \end{array} \right.$$

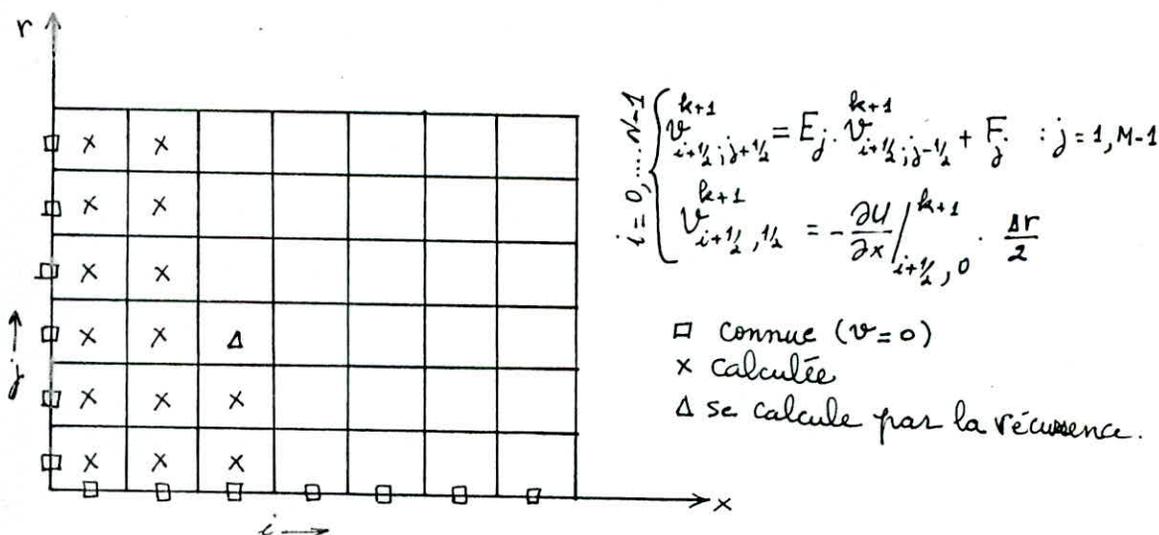
Avec A_j, C_j constantes dépendants de j
 B constante
 $K_{i,j}^k$ constante dépendant de i, j et k

Il sera résolu par la méthode de balayage $\langle 1B \rangle, \langle 1B' \rangle$.

- Pour l'équation de conservation de masse:

- 1°- Le terme v/r sera approximé de manière à faire apparaître la dérivée $\frac{\partial v}{\partial r}$.
- 2°- Toutes les dérivées seront approximées par des différences centrales implicites.
- 3°- Les vitesses v seront calculées aux milieux des mailles du réseau.

L'équation ainsi discrétisée, donne une équation algébrique qui donne directement v en $j+1/2$ connaissant v en $j-1/2$ et u en (i,j) et $(i+1,j)$; ces deux dernières sont calculées à partir de l'équation de mouvement plus haut.



Pour les développements mathématiques et pour plus de détails, voir annexe.

II.1- Exemples

Pour les exemples qui vont suivre, les calculs ont été faits avec les paramètres suivants:

Rayon de l'orifice de gaz $R = 2\text{mm}$
 Longueur du domaine: $12.R = 24\text{mm}$
 Largeur du domaine: $6.R = 12\text{mm}$
 Rayon du tube extérieur $RR = 5.2\text{mm}$
 Pas dans la direction axiale $x=0.4\text{mm}$
 Pas dans la direction radiale $r=0.4\text{mm}$
 Pas dans le temps $t=0.001\text{ sec}$

Les vitesses moyennes U_m et U_M , ainsi que la viscosité cinématique ν seront précisées pour chaque exemple.

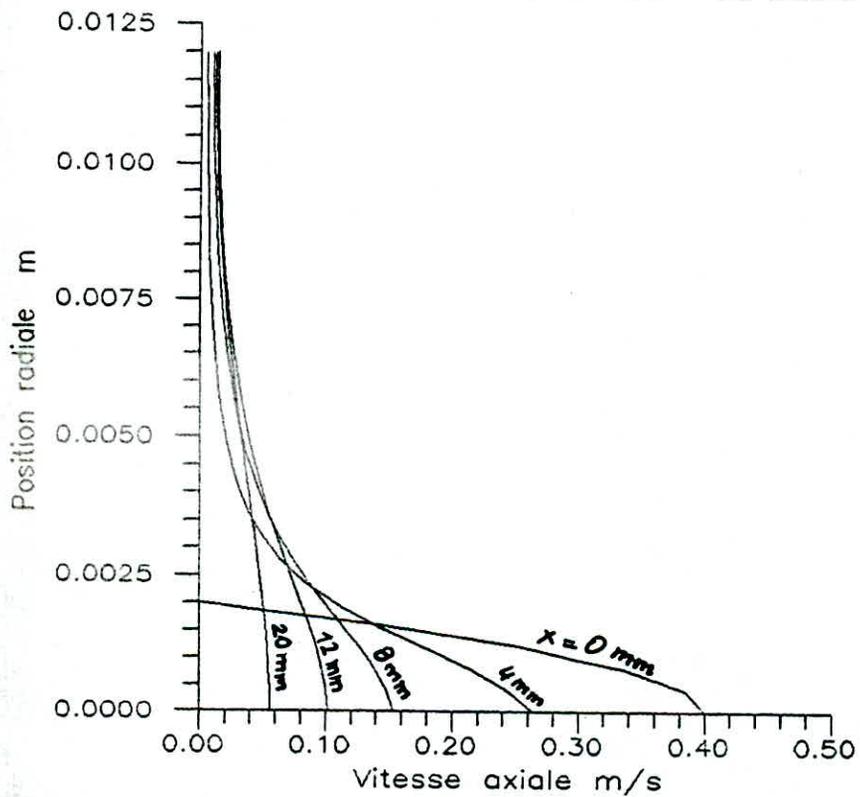
Exemple 1:

$$U_m = 0.20 \text{ m/s}$$

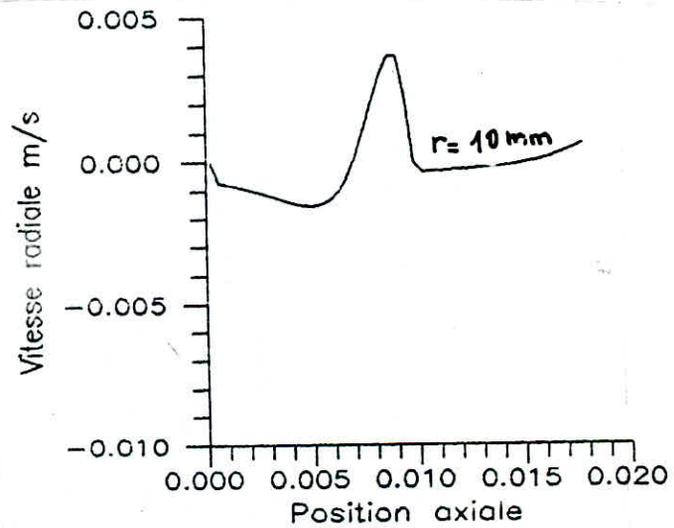
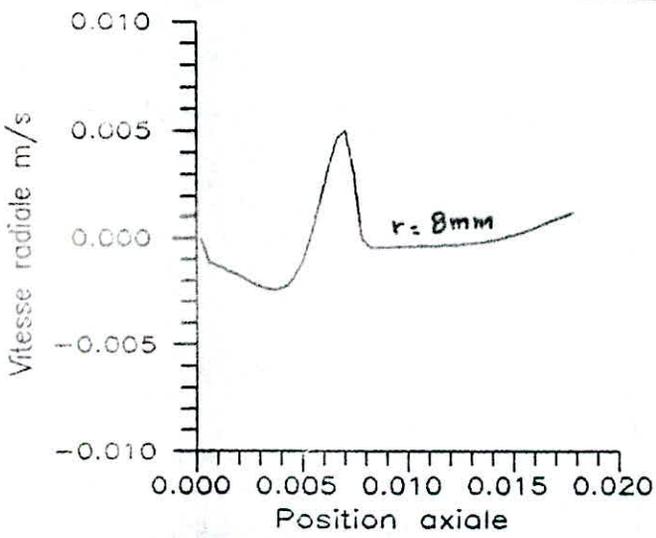
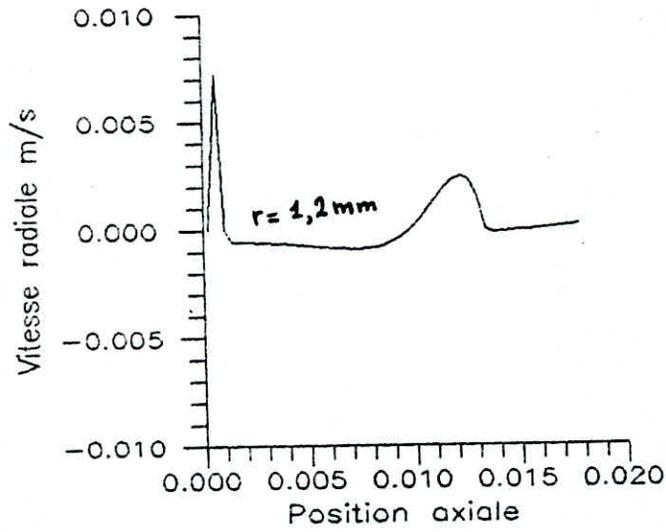
$$U_M = 0.00 \text{ m/s} \quad (\text{pas de jet d'air})$$

$$\dot{V} = 40\text{E-}6 \text{ m}^3/\text{s}$$

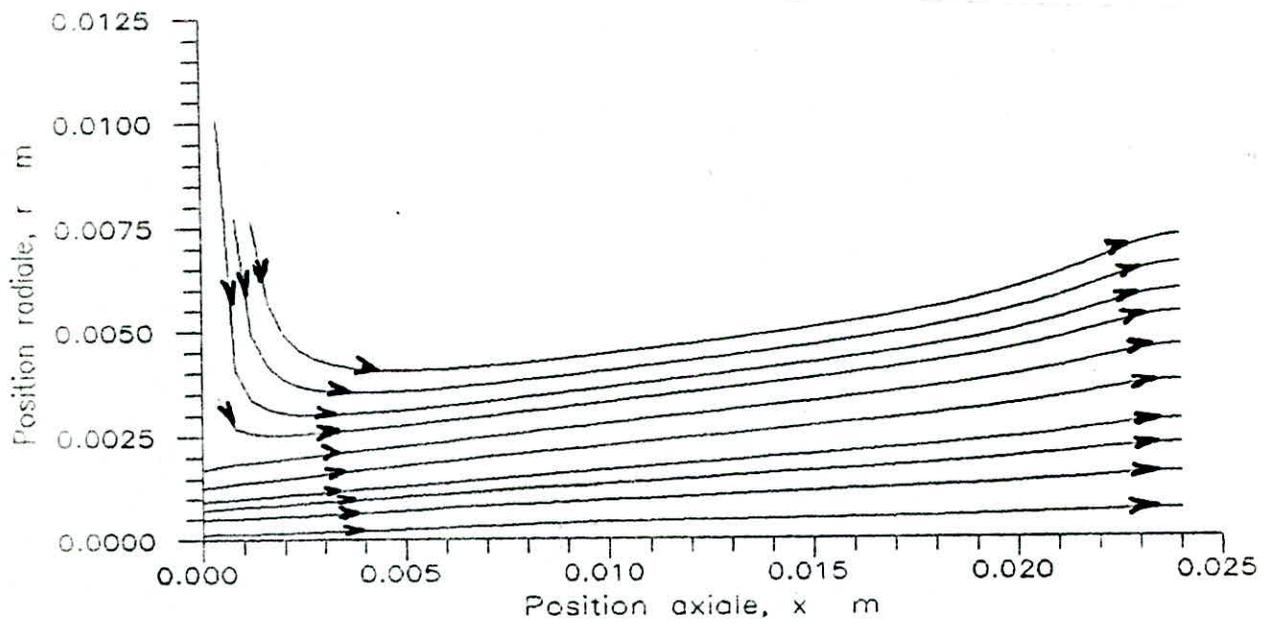
Le régime établi a été atteint pour $t = 0.9 \text{ s}$



Distributions de la vitesse axiale u à différentes distances de l'orifice du jet



Distributions de la vitesse radiale v
pour différentes valeurs de r



Lignes de courant du jet ($\psi = \text{cstes}$)

Remarque:

Le calcul de la fonction de courant ψ s'est fait par intégration numérique de l'équation

$$d\psi = u r dr$$

$$\Rightarrow \psi = \int_0^r u r dr$$

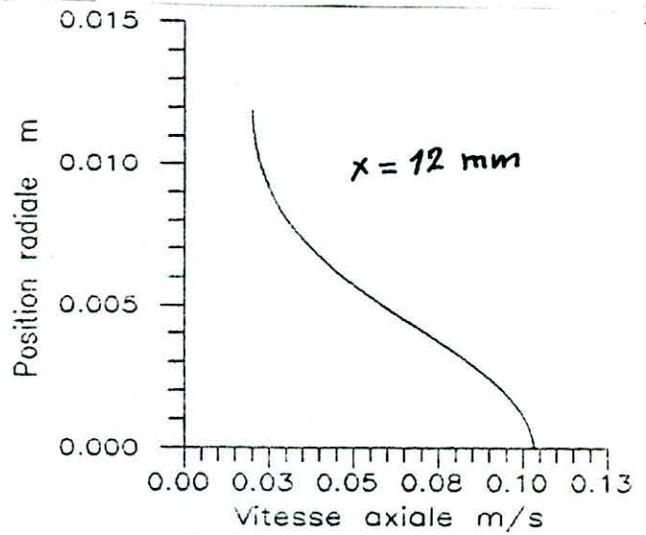
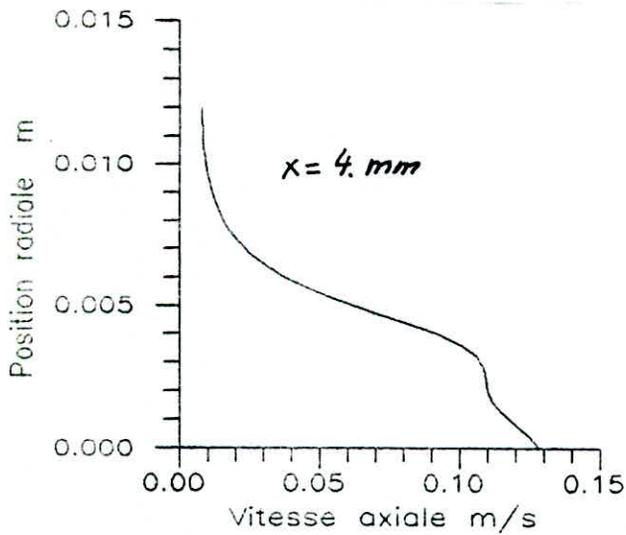
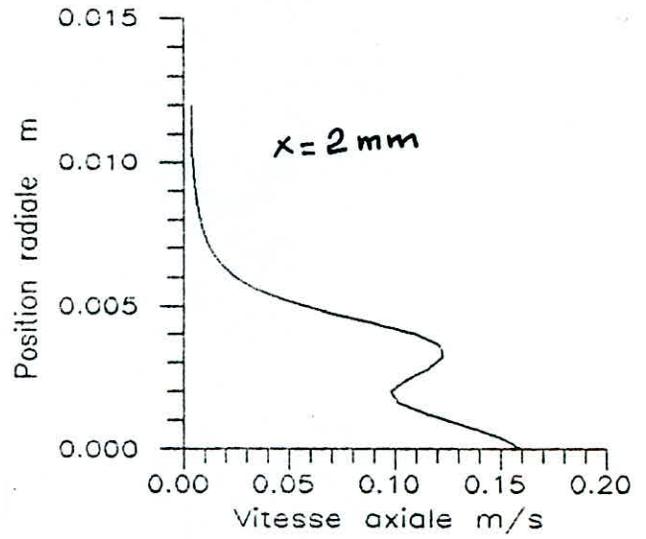
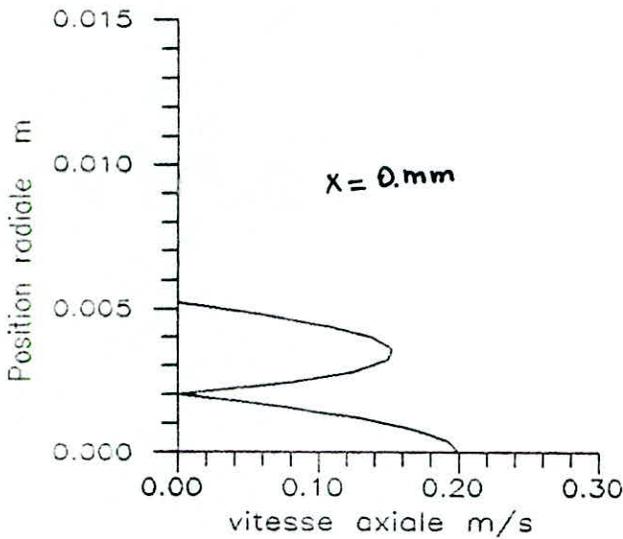
sur l'axe ($r=0$) ψ étant nulle.

Exemple 2:(Jets coaxiaux)

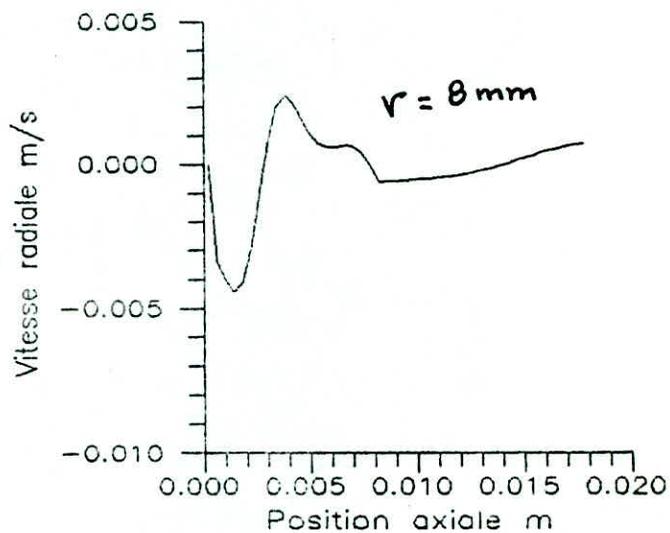
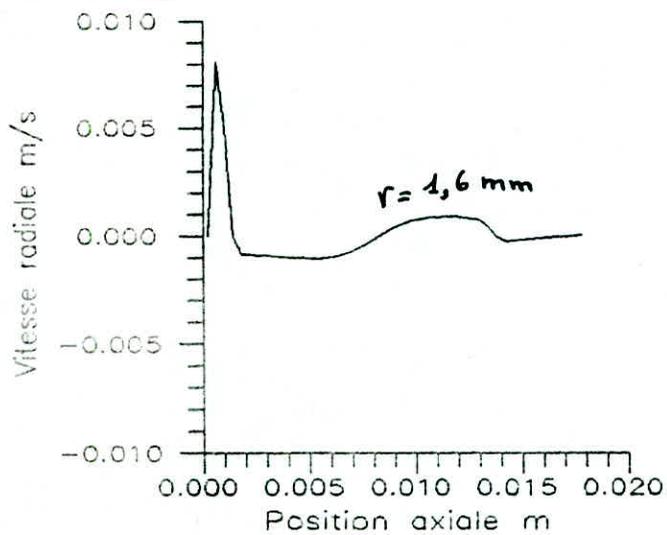
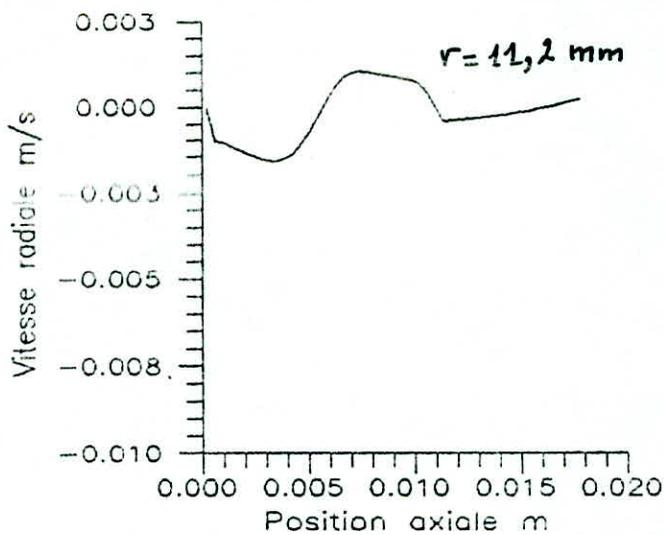
$$U_m = 0.10 \text{ m/s}$$

$$U_M = 0.15 \text{ m/s}$$

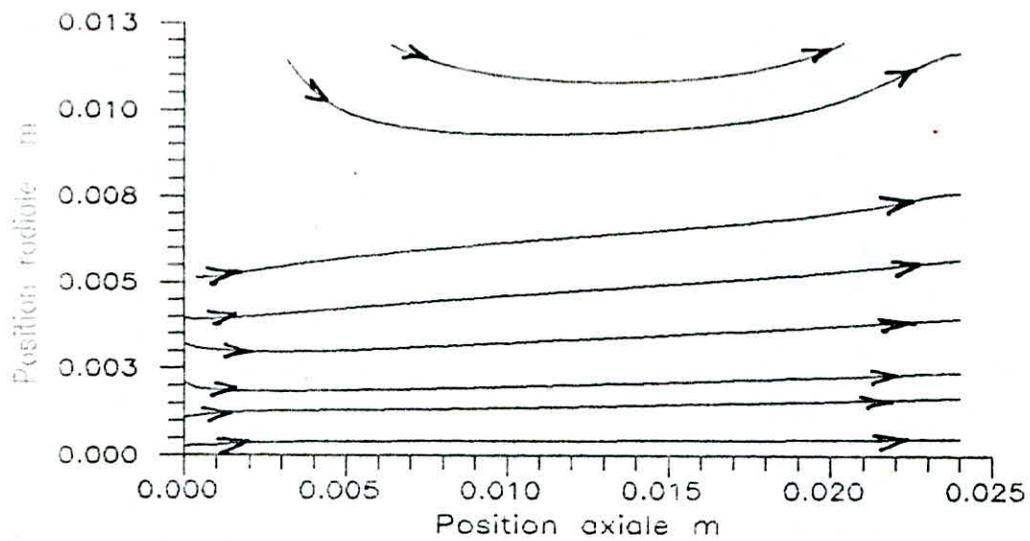
$$\nu = 30E-6 \text{ m}^2/\text{s}$$



Distribution de la vitesse axiale u à différentes distances de la sortie des deux jets



Profil s des vitesses radiales v
pour différentes valeurs de r



Lignes de courant

III) CALCUL DES CONCENTRATIONS ET DES TEMPERATURES,
SOUS L'HYPOTHESE D'UNE REACTION INFINIMENT RAPIDE

L'équation à intégrer est

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial r} = D \cdot \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right\}$$

Elle sera discretisée de façon similaire à l'équation de mouvement vue plus haut.

La seule différence est que les termes de convection $u \frac{\partial f}{\partial x}$ et $v \frac{\partial f}{\partial r}$ seront approximés par la technique "upwinding" <19> qui est très efficace lorsque la convection domine la diffusion ou lorsque la grandeur à calculer subit des variations brusques.

$$W \frac{\partial f}{\partial \xi} \approx W_{ij} \cdot \left\{ \frac{-f_{i+2,j}^k + 8f_{i+1,j}^k - 8f_{i-1,j}^k + f_{i-2,j}^k}{12\Delta\xi} \right\} \\ + |W_{ij}| \cdot \left\{ \frac{f_{i+2,j}^k - 4f_{i+1,j}^k + 6f_{ij}^k - 4f_{i-1,j}^k + f_{i-2,j}^k}{12\Delta\xi} \right\}$$

$$W = u, v \quad ; \quad \xi = x, r$$

Voir annexe

Une fois les f calculés, les concentrations Y_o , Y_f et la température t se calculeront comme vu au III du chapitre 3 :

Si $f \geq f_{stoe}$:

$$Y_o = 0$$

$$Y_f = f + \frac{Y_{o\infty}}{S} (f - 1)$$

$$T = (T_o - T_{\infty} + Y_{F_o} \frac{\Delta H^{\circ}}{C_p}) f + T_{\infty} - Y_f \frac{\Delta H^{\circ}}{C_p}$$

Si $f < f_{stoe}$

$$Y_f = 0$$

$$Y_o = Y_{o\infty} - (S + Y_{o\infty}) \cdot f$$

$$T = (T_o - T_{\infty} + Y_{F_o} \frac{\Delta H^{\circ}}{C_p}) f + T_{\infty}$$

III.1- Exemple:

La distribution de vitesses est celle de l'exemple 2 du paragraphe II (jets coaxiaux).

Les valeurs des grandeurs physiques sont:

Coefficient de diffusion $D=3E-5$ m²/s

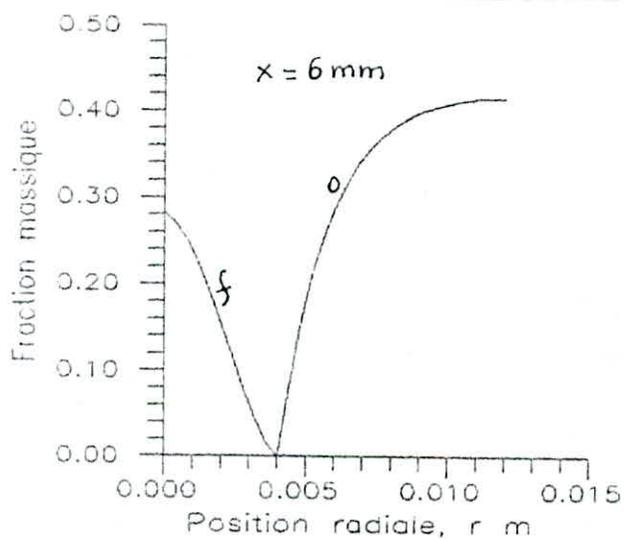
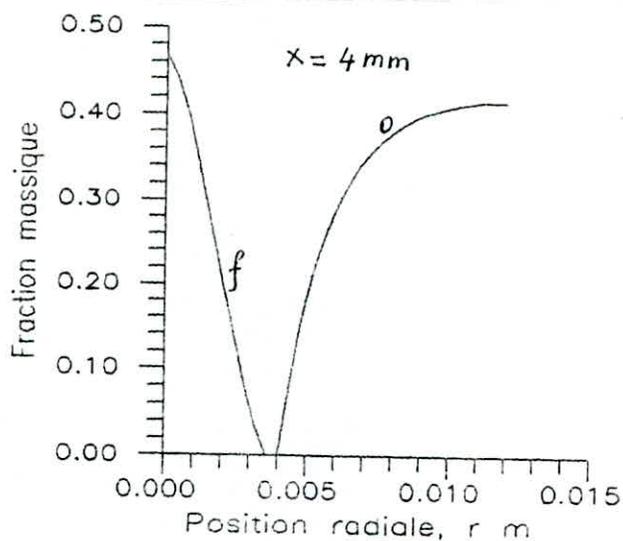
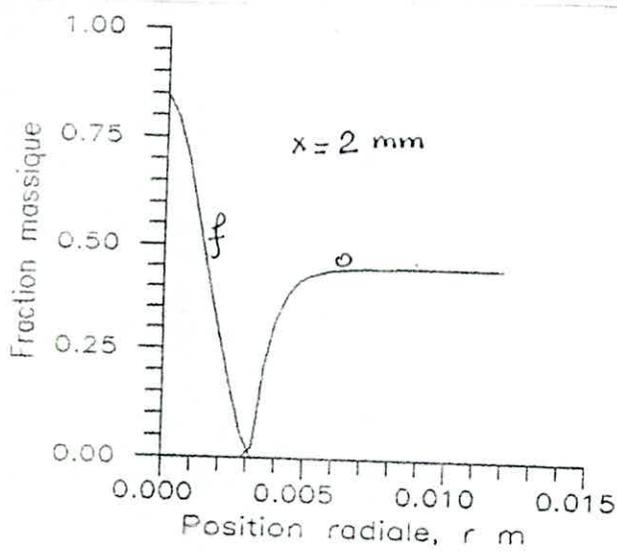
Rapport massique oxydant/fuel stoechio. $s=4$

Fraction massique de l'oxydant à l'infini $Y_{o\infty}=0.45$
(air enrichie en oxygène)

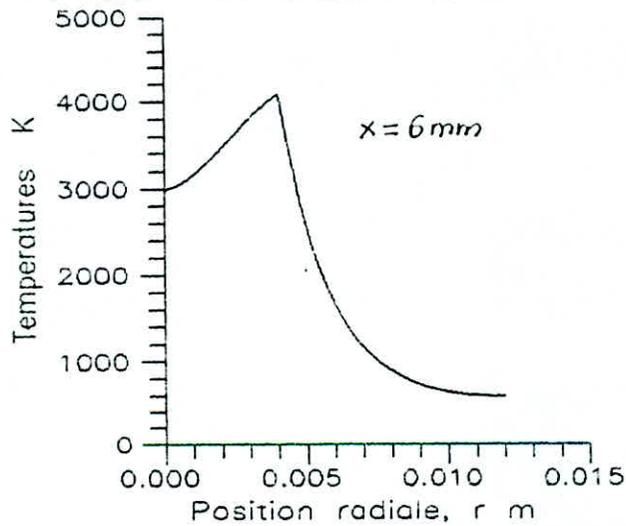
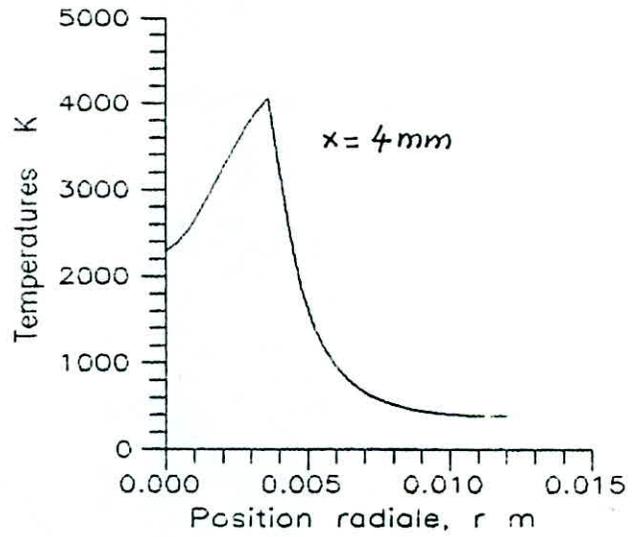
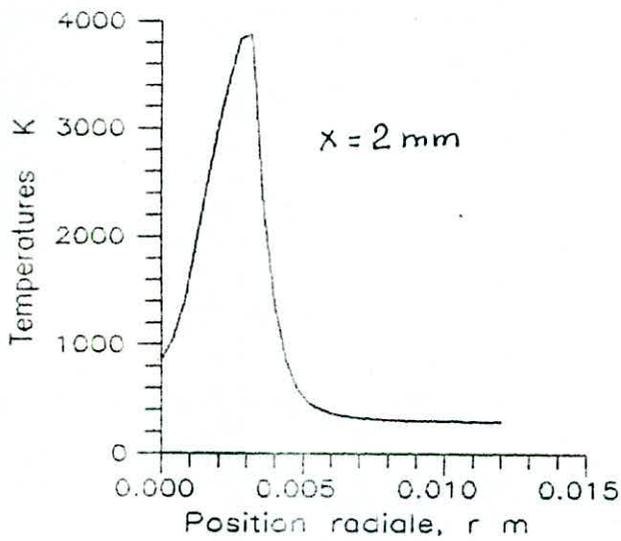
Températures ambiante et du fuel $T_o=T_{\infty}=298$ K

Chaleur spécifique $C_p=1.2$ Kj/Kg/K

Chaleur de réaction = 45000 Kj/Kg



Distributions du combustible (f) et de l'oxydant (o) à différentes distances (x) de la sortie des jets



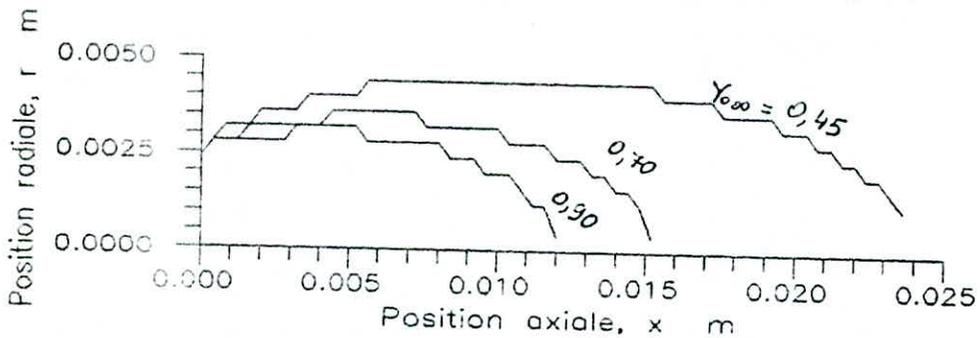
Distribution des températures à différentes distances (x) de la sortie des jets

Les températures sont suréstimées à plus de 500 K comme prévu dans $\langle 4 \rangle$, pour l'hypothèse d'une réaction infiniment rapide.

*** Effet de la concentration $Y_{O\infty}$ sur les dimensions d'une flamme:

$Y_{O\infty}$ étant la concentration (fraction massique) de l'oxydant dans l'atmosphère.

La grandeur s étant fixée égale à 4



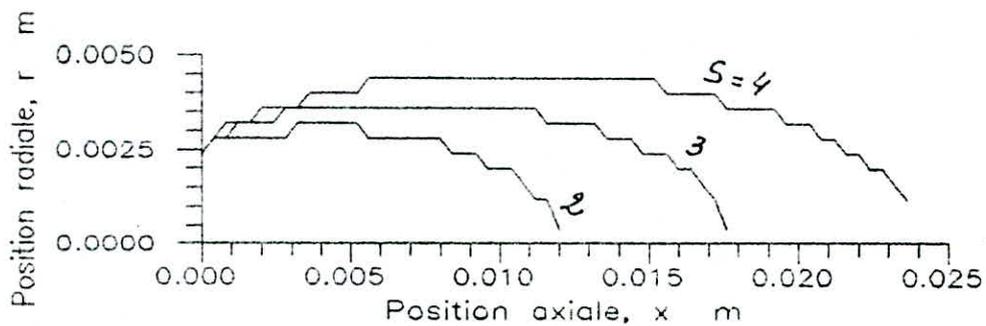
Zones de réactions (flammes)
pour différentes valeurs de $Y_{O\infty}$

On voit que plus l'air est riche en oxydant (i.e pauvre en gaz neutre) plus la flamme est petite.
Ceci s'explique du fait que lorsque la concentration en oxydant est élevée, la surface nécessaire à la réaction est réduite pour un débit de combustible donné.

*** Effet de s sur les dimensions d'une flamme

s est le rapport massique oxydant/fuel stoechiométrique.

La valeur de Y_{O_2} est fixée à 0.45



Zones de réactions (flammes)
pour différentes valeurs de s

On voit que plus s est élevé plus la flamme est volumineuse. L'explication est: lorsque s est élevée ceci signifie que la réaction nécessite plus d'oxydant; et afin de pouvoir capter la quantité qu'il faut, la surface de réaction doit être plus grande.

IV) CALCUL DES CONCENTRATIONS ET DES TEMPERATURES:
REACTION A VITESSE FINIE

Le système à intégrer est le suivant:

$$\begin{cases} \frac{\partial Y_F}{\partial t} + u \frac{\partial Y_F}{\partial x} + v \frac{\partial Y_F}{\partial r} = D_f \left\{ \frac{\partial^2 Y_F}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_F}{\partial r} \right\} - \frac{1}{f} \cdot \dot{W}_f \\ \frac{\partial Y_o}{\partial t} + u \frac{\partial Y_o}{\partial x} + v \frac{\partial Y_o}{\partial r} = D_o \left\{ \frac{\partial^2 Y_o}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_o}{\partial r} \right\} - \frac{s}{f} \cdot \dot{W}_f \\ \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial r} = a \left\{ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right\} + \frac{\Delta H^o}{\rho C_p} \cdot \dot{W}_f \end{cases}$$

Avec les conditions aux limites et initiales données au paragraphe V du chapitre 3.

Pour l'expression de \dot{W}_f , revenir au paragraphe VI du chapitre 1

Les équations ci dessus seront discrétisées de manière à ce que la première nous donnera Y_f , la deuxième Y_o et la troisième T .

Chacune des trois équations se discrétisera comme l'équation en f du paragraphe précédent, sauf que les termes sources dans les seconds membres seront évalués explicitement i.e à $t = k \cdot \Delta t$, et ainsi ils constitueront de simples constantes dans les équations discrétisées (voir annexe pour plus de détails).

La méthode de discrétisation ainsi conçue n'a malheureusement pas abouti; les essais ont montré que c'est dû au facteur exponentiel dans l'expression de \dot{W}_f ; celui ci prend des valeurs très élevées pour les hautes températures et occasionne des oscillations qui entraînent des divergences dans les calculs. Le programme informatique correspondant est 'COMBUSTION 2'.

V) CALCUL DES CONCENTRATIONS DU GAZ NEUTRE

L'équation à intégrer est la suivante:

$$\frac{\partial Y_n}{\partial t} + u \frac{\partial Y_n}{\partial x} + v \frac{\partial Y_n}{\partial r} = D_n \left\{ \frac{\partial^2 Y_n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_n}{\partial r} \right\}$$

avec les conditions aux limites données plus haut; les conditions initiales seront modifiées.

Cette équation est identique à celle du paragraphe III; la seule différence réside dans les conditions initiales. Elle sera discrétisée similairement.

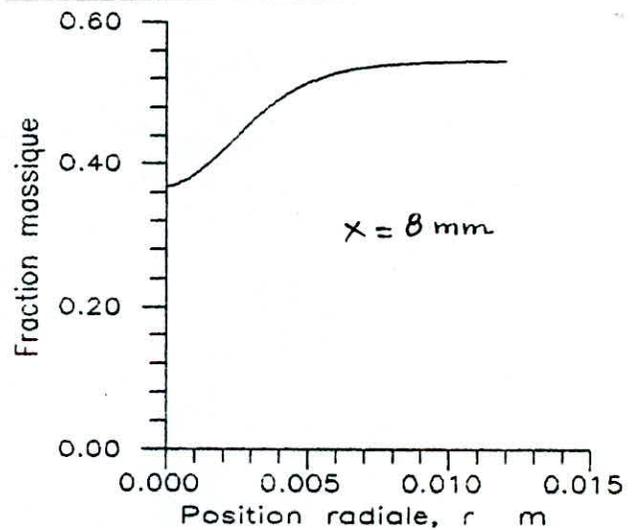
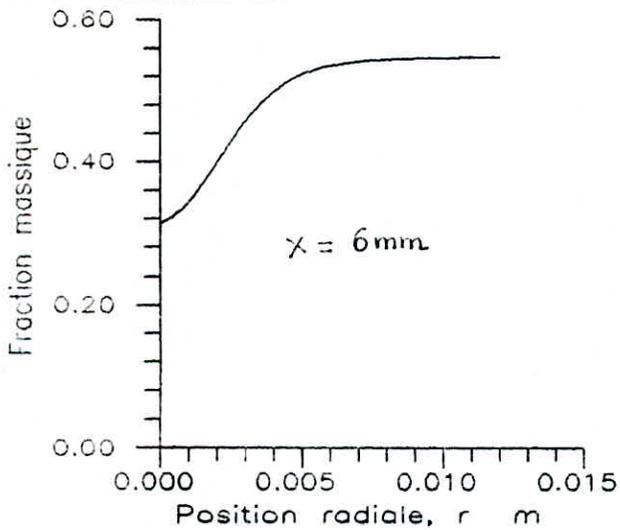
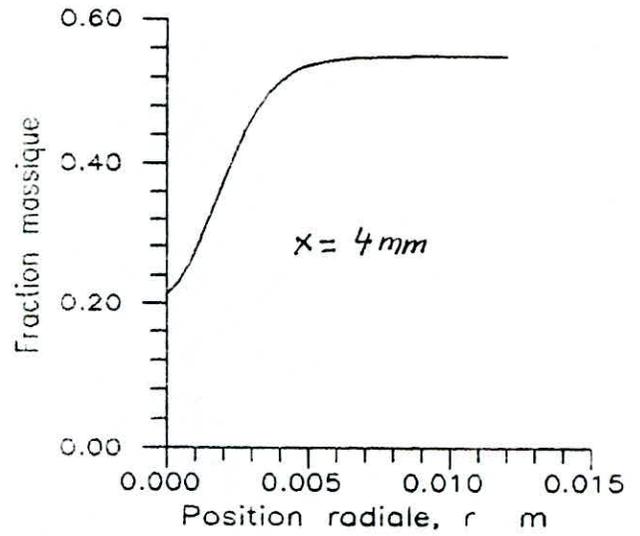
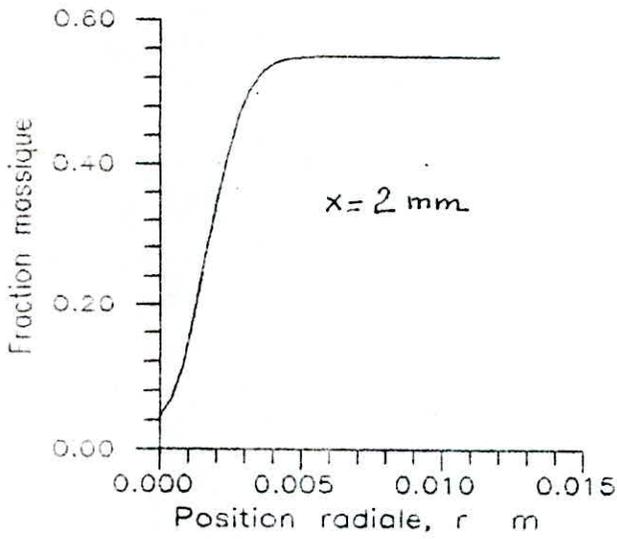
Remarque:

A Noter que les résultats de cette intégration ne sont pas affectés par l'hypothèse d'une réaction infiniment rapide du fait que cette espèce n'est pas réactive.

V.1- Exemple

La distribution de vitesse est toujours celle de l'exemple 2 du paragraphe II (jets coaxiaux)

Le coefficient de diffusion du gaz neutre $D_n=4E-5 \text{ m}^2/\text{s}$



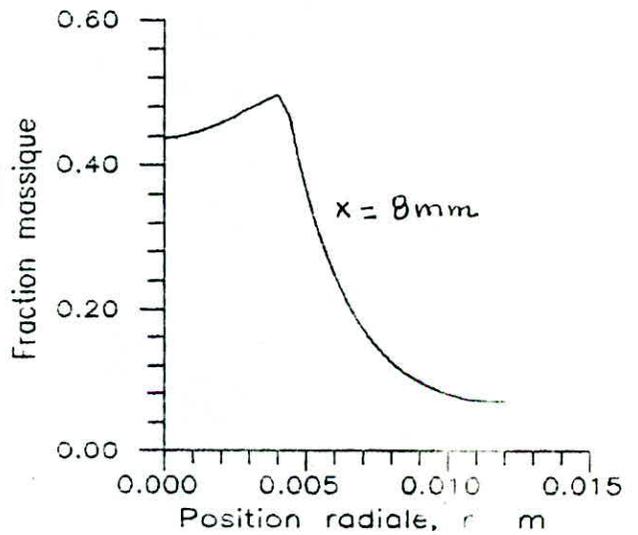
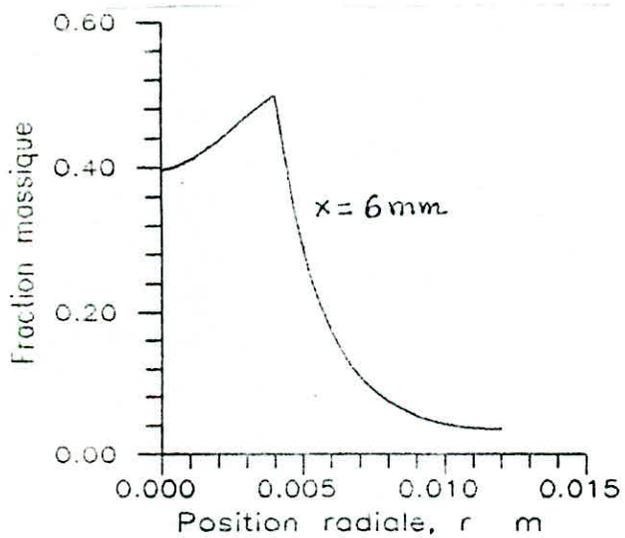
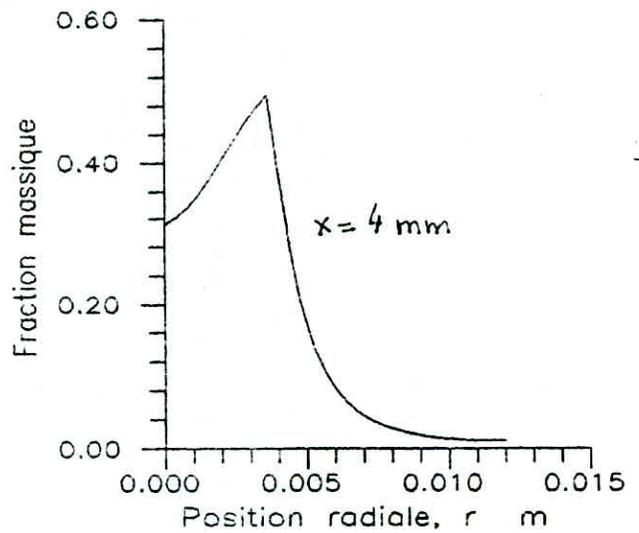
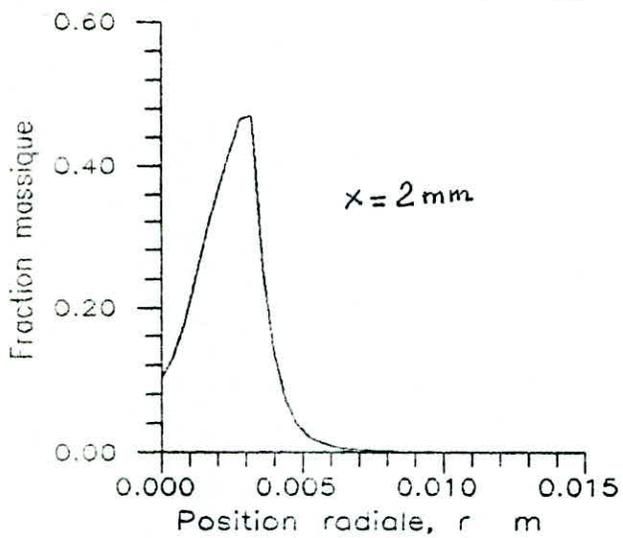
Profils des concentrations du gaz neutre
à différentes distances (x) de la sortie des jets

VI) DEDUCTION DES CONCENTRATIONS EN PRODUITS DE REACTION

Après avoir calculé les concentrations Y_f , Y_o , et Y_n , le calcul des concentrations en produits de réaction Y_p se fera par l'équation algébrique:

$$Y_p = 1 - Y_f - Y_o - Y_n$$

(courbes, page suivante)



Profils des concentrations en produits de réaction à différentes distances (x) de la sortie des jets

C O N C L U S I O N

CONCLUSION

L'aboutissement de ce travail a été l'intégration numérique des équations du jet libre axisymétrique en atmosphère libre; puis la détermination des concentrations des espèces réactives et des températures pour une flamme de diffusion pour qui la réaction est supposée infiniment rapide; puis les concentrations du gaz neutre et enfin, la déduction des concentrations des produits de réaction. Ceci nous a permis de mettre en évidence certaines propriétés des flammes de diffusion vérifiées par l'expérience.

Vu les hypothèses faites (masse volumique constante, réaction infiniment rapide ...), les résultats n'ont d'importance que sur le plan qualitatif; néanmoins, ils peuvent constituer les valeurs de départ pour des calculs ultérieurs ou seront abandonnées ces hypothèses d'idéalisations.

Les schémas aux différences utilisés dans ce travail ont été établis après consultation de certains ouvrages sur les différences finis. La difficulté résidait dans l'adaptation des principes des différences finis au cas de notre problème afin d'aboutir à des algorithmes convergents. Ceci a pris le plus grand temps de travail.

La manière de discrétiser les équations dans ce problème peut être exploitée pour l'intégration des équations de couche limite hydrodynamique, thermique et diffusive de configuration axisymétrique, tout en tenant compte des termes $\frac{\partial}{\partial x^2}$ ceci dans le cas où l'on supposera la masse volumique, la viscosité, les coefficients de diffusion et la conductibilité thermique comme constants:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} = \nu \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} = 0 \\ \frac{\partial Y_i}{\partial t} + u \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v \frac{\partial Y_i}{\partial r} = D_i \left\{ \frac{\partial^2 Y_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_i}{\partial r} + \frac{\partial^2 Y_i}{\partial x^2} \right\} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial r} = a \left\{ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right\} \end{array} \right.$$

Les modifications nécessaires seront faites selon les conditions aux limites.

Le départ réel de ce travail n'a été effectué que très tard, ceci par le manque de documents et de sources d'informations.

Ce type de travail nécessite un temps assez important, car il doit être précédé par une préparation théorique afin de cerner le problème et une recherche bibliographique qui bien sur, pose son problème. Ajouter a ceci la nature du travail qui consiste à 'essayer' des méthodes. Avoir au départ une méthode directement adaptable peut faire économiser beaucoup de temps tout en donnant un maximum de chance pour aboutir à des résultats. Une méthode est décrite sommairement par S.V. Patankar dans <19>, mais pour pouvoir l'exploiter, il faut avoir d'autres références indiquées toujours dans <19>.

Une difficulté a été rencontrée liée au type de méthode conjuguée au matériel informatique utilisé. En effet la méthode de stationnarisation est connue pour ses bonnes qualités de convergences, mais nécessite beaucoup plus de calculs que les méthodes calculant directement l'état stationnaire; les calculs ont été faits sur micro-ordinateur pc, ce qui a contribué à rendre les temps de calculs très longs (le programme 'VITESSES' a nécessité 22 heures).

Les dimensions du domaine d'intégration (12R x 6R) ont été en réalité imposées par la capacité limitée du matériel informatique; en particulier, la dimension radiale est peu suffisante.

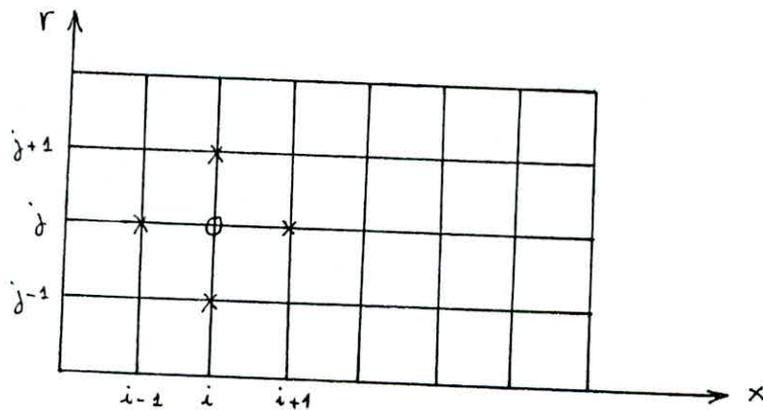
A N N E X E

Annexe

I. Discretisation de l'équation de Mouvement et de l'équation de continuité

I.1 : Equation de Mouvement :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} = \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \quad (1)$$



Posons : $x_i = i \cdot \Delta x$, $i = 0 \dots N$

$r_j = j \cdot \Delta r$, $j = 0 \dots M$

$t_k = k \cdot \Delta t$, $k = 0 \dots$

Le terme $\frac{\partial u}{\partial t}$ sera approché comme suit :

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{ij}^k \approx \frac{u_{ij}^{k+1} - u_{ij}^k}{\Delta t}$$

Comme précisé au chapitre IV, les termes de convection $u \frac{\partial u}{\partial x}$, $v \frac{\partial u}{\partial r}$ et le terme de diffusion $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ seront approximatés par des schémas aux différences explicites:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{ij}^k \approx u_{ij}^k \frac{u_{i+1,j}^k - u_{i-1,j}^k}{2\Delta x}$$

$$v \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{ij}^k \approx v_{ij}^k \frac{u_{i,j+1}^k - u_{i,j-1}^k}{2\Delta r}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{ij}^k \approx \frac{u_{i+1,j}^k - 2u_{ij}^k + u_{i-1,j}^k}{(\Delta x)^2}$$

Par contre, les termes de diffusion $\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}$ et $\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r}$ seront approximatés par des schémas aux différences implicites:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \Big|_{ij}^{k+1} \approx \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - 2u_{ij}^{k+1} + u_{i,j-1}^{k+1}}{(\Delta r)^2}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{ij}^{k+1} \approx \frac{1}{r_j} \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1}}{2\Delta r}$$

On substituant ces expressions dans l'équation (1), celle-ci se met alors sous la forme :

$$\boxed{-A_j \cdot u_{i,j+1}^{k+1} + B \cdot u_{ij}^{k+1} - C_j \cdot u_{i,j-1}^{k+1} = K_{ij}^k} \quad (1.1)$$

Avec :

$$A_j = \frac{(2j+1)\sqrt{v}}{2j \cdot \Delta r^2} \quad B = \frac{1}{\Delta t} + \frac{2\sqrt{v}}{\Delta r^2} \quad C_j = \frac{(2j-1)\sqrt{v}}{2j \cdot \Delta r^2}$$

$$K_{ij}^k = \frac{u_{ij}^k}{\Delta t} + \sqrt{v} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{ij}^k - u \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{ij}^k - v \left. \frac{\partial u}{\partial r} \right|_{ij}^k$$

Introduction des conditions aux limites

* Sur l'axe des abscisses, $\frac{\partial u}{\partial r} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{j=0} = 0$

$$\text{donc } u_{i,1} = u_{i,(-1)}$$

Par conséquent (1.1) s'écrit alors :

$$- (A+C)_{j=0} \cdot u_{i,1}^{k+1} + B \cdot u_{i,0}^{k+1} = K_{i,0}^k$$

or :

$$(A+C)_{j=0} = \frac{2\sqrt{v}}{\Delta r^2} \quad \text{et} \quad K_{i,0}^k = \frac{u_{i,0}^k}{\Delta t} + \sqrt{v} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{i,0}^k - u \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i,0}^k$$

donc :

$$\left\{ - \frac{2\sqrt{v}}{\Delta r^2} \cdot u_{i,1}^{k+1} + B \cdot u_{i,0}^{k+1} = K_{i,0}^k \right\}$$

* Sur la frontière dans la direction radiale, on a également $\frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{i,M} = 0$

Avec le même raisonnement que précédemment,

$$\ddot{u}_{i,M-1}^k = \ddot{u}_{i,M+1}^k$$

et (1.1) devient

$$\left\{ B \cdot u_{i,M}^{k+1} - \frac{2V}{\Delta r^2} \cdot u_{i,M-1}^{k+1} = K_{i,M}^k \right\}$$

Avec

$$K_{i,M}^k = \frac{u_{i,M}^k}{\Delta t} + \sqrt{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}} \Big|_{i,M}^k - u \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i,M}^k$$

* Sur la frontière dans la direction axiale, (1.1)

garde la même forme, sauf qu'il faut tenir compte

dans $K_{i,j}^k$ du fait que $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i=N} = 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{N,j} = 0 \Rightarrow u_{N-1,j} = u_{N+1,j}, \text{ et par conséquent}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_{N,j}^k = 2 \cdot \frac{-u_{N,j}^k + u_{N-1,j}^k}{\Delta x^2}$$

$$\text{d'où : } K_{N,j}^k = \frac{u_{N,j}^k}{\Delta t} + \sqrt{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}} \Big|_{N,j}^k - u \cdot \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{N,j}^k$$

Conditions Initiales

$$\forall i, \forall j ; 1 \leq i \leq N, 0 \leq j \leq M ; u_{i,j}^0 = 0$$

Pour $i=0$, le profil des vitesses axiales u est connu à tout instant.

- Cas de deux jets coaxiaux : (voir page 29)

$$\text{Si } R = j_R \cdot \Delta r \quad \text{et} \quad R_R = j_{RR} \cdot \Delta r$$

Alors :

$$\text{pour } 0 \leq j \leq j_R ; \quad u_{0,j}^k = \frac{2U_m}{R^2} (R^2 - (j \cdot \Delta r)^2)$$

Écoulement de Poiseuille

$$\text{pour } j_R \leq j \leq j_{RR} ; \quad u_{0,j}^k = \frac{2U_M}{(R_R - R)^2} \left\{ R_R^2 - (j \cdot \Delta r)^2 + \right. \\ \left. + \frac{\ln(j \cdot \Delta r / R)}{\ln(R_R / R)} \cdot (R_R^2 - R^2) \right\}$$

$$\text{pour } j_{RR} \leq j \leq M ; \quad u_{0,j}^k = 0$$

U_m et U_M sont les vitesses moyennes respectivement de l'écoulement dans le tube intérieur et dans l'espace annulaire.

- Cas d'un seul jet :

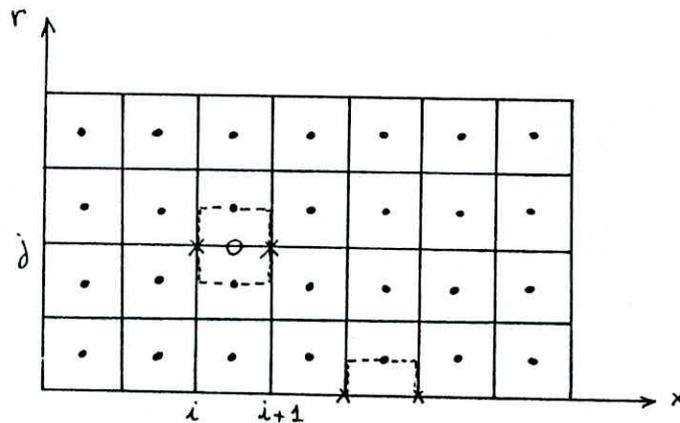
$$\text{pour } 0 \leq j \leq j_R ; \quad u_{0,j}^k = \frac{2U_m}{R^2} (R^2 - (j \cdot \Delta r)^2)$$

$$\text{pour } j_R \leq j \leq M ; \quad u_{0,j}^k = 0$$

I.2 Equation de continuité :

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} = 0 \quad (2)$$

Les différents termes seront approximatés à l'instant $(k+1)\Delta t$ (ie. implicitement) au point $(i+\frac{1}{2}, j)$



$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{i+\frac{1}{2}, j}^{k+1} \approx \frac{u_{i+1, j}^{k+1} - u_{i, j}^{k+1}}{\Delta x}$$

$$\left. \frac{\partial v}{\partial r} \right|_{i+\frac{1}{2}, j}^{k+1} \approx \frac{v_{i+\frac{1}{2}, j+\frac{1}{2}}^{k+1} - v_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{k+1}}{\Delta r}$$

$$\left. \frac{v}{r} \right|_{i+\frac{1}{2}, j}^{k+1} \approx \frac{1}{j} \left\{ \left. \frac{\partial v}{\partial r} \right|_{i+\frac{1}{2}, j}^{k+1} \cdot \frac{\Delta r}{2} + v_{i+\frac{1}{2}, j-\frac{1}{2}}^{k+1} \right\}$$

(interpolation linéaire)

Après substitution dans l'équation (2), celle-ci s'écrit
 alors sous la forme :

$$\boxed{v_{i+1/2, j+1/2}^{k+1} = E_j \cdot v_{i+1/2, j-1/2}^{k+1} + F_j} \quad (2.1)$$

où :

$$E_j = \frac{2j-1}{2j+1} \quad F_j = -\frac{2j \Delta r}{2j+1} \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2, j}^{k+1}$$

Introduction des conditions aux limites

* Sur l'axe des abscisses, on a $v=0$ c.à.d $\ddot{v}_{i,0} = 0$
 Si on fait l'approximation suivante :

$$\frac{v_{i, 1/2} + v_{i, -1/2}}{2} \approx v_{i,0} = 0$$

ce qui implique :

$$v_{i+1/2, 1/2} \approx -v_{i+1/2, -1/2}$$

donc

$$\frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{i+1/2, 0}^{k+1} \approx \frac{2}{\Delta r} \cdot v_{i+1/2, 1/2}^{k+1}$$

$$\frac{v}{r} \Big|_{i+1/2, 0}^{k+1} = 0$$

En remplaçant dans (2) : $\left\{ v_{i+1/2, 1/2}^{k+1} = -\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1/2, 0}^{k+1} \cdot \frac{\Delta r}{2} \right\}$

* Sur la frontière dans la direction axiale c.à.d $i = N$, il faut tenir compte dans (2.1) et (2.1') du fait que :

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{N,j} = 0$$

et on fera l'approximation $\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{N-1/2,j} \approx 0$

Conditions initiales

à l'instant $t = 0$ sec, les vitesses radiales $v_{i,j}^0$ sont nulles et sur les frontières et à l'intérieur du domaine d'intégration.

$$v_{0,j+1/2}^0 = 0 \quad ; \quad v_{i+1/2,j+1/2}^0 = 0 \quad ; \quad v_{i+1/2,0}^0 = 0$$

I.3. Écriture finale du schéma aux différences :

Le système d'équations :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial r} = \nu \cdot \left\{ \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right\} \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{v}{r} = 0 \end{cases}$$

Une fois discretisé, et compte tenu des conditions aux

limites et initiales devient :

$$\left. \begin{array}{l} k = 0 \dots (\text{Etat stationnaire}) \\ \text{(I)} \quad j = 1 \dots N \\ \text{(II)} \quad i = 0 \dots N-1 \\ \text{(III)} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \left. \begin{array}{l} -A_j \cdot \mu_{i,j+1}^{k+1} + B \mu_{i,j}^{k+1} - C_j \cdot \mu_{i,j-1}^{k+1} = K_{i,j}^k \\ -\frac{2\sqrt{\mu}}{\Delta r^2} \mu_{i,1}^{k+1} + B_{i,0}^{k+1} = K_{i,0}^k \\ B \mu_{i,M}^{k+1} - \frac{2\sqrt{\mu}}{\Delta r^2} \cdot \mu_{i,M-1}^{k+1} = K_{i,M}^k \end{array} \right\} j = 1 \dots M-1 \\ \text{Conditions initiales : selon les 2 cas vus précédemment} \\ \left. \begin{array}{l} \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+1} = E_j \cdot \mu_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{k+1} + F_j \quad ; j = 1 \dots M-1 \\ \mu_{i+\frac{1}{2},\frac{1}{2}}^{k+1} = -\frac{\partial \mu}{\partial x} \Big|_{i+\frac{1}{2},0}^{k+1} \cdot \frac{\Delta r}{2} \\ \mu_{0,j+\frac{1}{2}}^0 = 0 \quad ; \quad \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^0 = 0 \quad ; \quad \mu_{i+\frac{1}{2},0}^0 = 0 \end{array} \right\} \\ \mu_{i,j}^{k+1} = \frac{1}{4} \left\{ \mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+1} + \mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+1} + \mu_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{k+1} + \mu_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{k+1} \right\} \\ i = 1; N \quad ; \quad j = 1 \dots M \end{array}$$

Remarque :

L'algorithme de calcul ci dessus, suit les étapes suivantes :

1°/ Calcul des vitesses axiales μ à partir de (I) par la méthode de balayage. (voir <12>, <17>)

2°/ Calcul des vitesses radiales v à partir de (II) par la récurrence indiquée.

3°/ Estimation des vitesses v aux nœuds du réseau par l'équation (III)

A noter que du fait que $\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{N,j} = \frac{\partial v}{\partial y} \Big|_{i,M} = 0$,

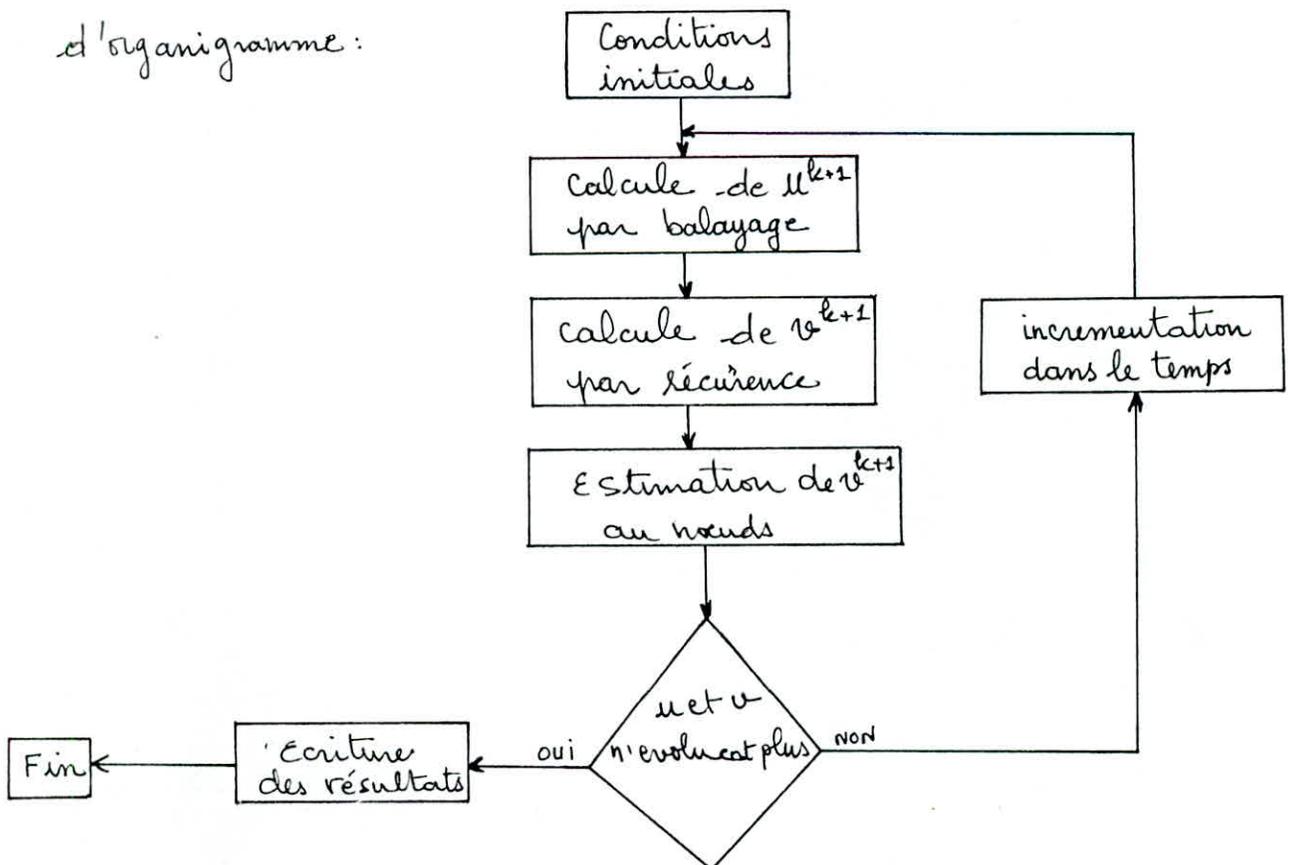
$$v_{N,j}^{k+1} \approx \frac{1}{2} \left\{ v_{N-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+1} + v_{N-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{k+1} \right\}$$

$$v_{i,M}^{k+1} \approx \frac{1}{2} \left\{ v_{i-\frac{1}{2},N-\frac{1}{2}}^{k+1} + v_{i+\frac{1}{2},N-\frac{1}{2}}^{k+1} \right\}$$

4°/ Incrémentation dans le temps et reprise en (I).

Sous forme

et organigramme :



II. Discretisation de l'équation en f (Trans. de Schwab et Zeldovitch)

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial r} = D \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right\} \quad (3)$$

Maintenant, les vitesses u et v sont connues; Notons u_{ij}^∞ et v_{ij}^∞ les vitesses u et v au point (i,j) au régime stationnaire.

Les différents termes de (3) seront approximés comme suit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{ij}^k &\approx \frac{f_{i,j}^{k+1} - f_{i,j}^k}{\Delta t} \\ u \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{ij}^k &\approx u_{ij}^\infty \left\{ \frac{-f_{i+2,j}^k + 8f_{i+1,j}^k - 8f_{i-1,j}^k + f_{i-2,j}^k}{12 \Delta x} \right\} + \\ &+ |u_{ij}^\infty| \left\{ \frac{f_{i+2,j}^k - 4f_{i+1,j}^k + 6f_{i,j}^k - 4f_{i-1,j}^k + f_{i-2,j}^k}{12 \Delta x} \right\} \\ &\text{"up winding" 3^{ème} ordre} \end{aligned}$$

$$v \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{ij}^k : \text{similairement à } u \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{ij}^k$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} \Big|_{ij}^{k+1} \approx \frac{f_{i,j+2}^{k+1} - 2 \cdot f_{i,j}^{k+1} + f_{i,j-2}^{k+1}}{\Delta r^2}$$

$$\frac{1}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{ij}^{k+1} \approx \frac{1}{r_j} \frac{f_{i,j+2}^{k+1} - f_{i,j-2}^{k+1}}{2 \Delta r}$$

Après substitution dans (3), on obtient une équation de la même forme que (1.1):

$$\boxed{-A_j \cdot f_{i,j+1}^{k+1} + B \cdot f_{i,j}^{k+1} - C_j \cdot f_{i,j-1}^{k+1} = K_{i,j}^k} \quad (3.1)$$

Les constantes A_j , B et C_j sont identiques à ceux de (1.1); la seule différence est que dans l'expression de $K_{i,j}^k$, le terme $D \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{i,j}^k$ ne figure pas ou qu'il a été négligé dans l'équation différentielle (3); mais il est possible de le reprendre (si on veut) en le manipulant comme le terme $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ de l'équation (1).

Introduction des conditions aux limites

* sur l'axe des abscisses, $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$, alors tous les points symétriques à cet axe seront considérés comme égaux.

(3.1) s'écrit alors:

$$\left\{ -\frac{2D}{\Delta r^2} \cdot f_{i,1}^{k+1} + B \cdot f_{i,0}^{k+1} = K_{i,0}^k \right\}$$

* sur la frontière dans la direction radiale, $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$; et avec le même raisonnement que plus haut, (3.1) s'écrit:

$$\left\{ B \cdot f_{i,M}^{k+1} - \frac{2D}{\Delta r^2} \cdot f_{i,M-1}^{k+1} = K_{i,M}^k \right\}$$

* Sur la frontière dans la direction axiale : $\frac{\partial f}{\partial x} = 0$

(3.1) garde la même forme, sauf qu'il faut tenir compte dans K_{ij}^k du fait que $\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{i=N} = 0$

(voir le même cas pour l'équation de mouvement)

page 58

Le schéma aux différences de l'équation (3) avec les conditions aux limites et initiales correspondantes s'écrit :

$$\left. \begin{array}{l}
 -A_j \cdot f_{i,j+1}^{k+1} + B \cdot f_{i,j}^{k+1} - C_j \cdot f_{i,j-1}^{k+1} = K_{ij}^k \quad ; \quad j=1 \dots M-1 \\
 -\frac{2D}{\Delta r^2} \cdot f_{i,1}^{k+1} + B \cdot f_{i,0}^{k+1} = K_{i,0}^k \\
 B \cdot f_{i,M}^{k+1} - \frac{2D}{\Delta r^2} \cdot f_{i,M-1}^{k+1} = K_{i,M}^k
 \end{array} \right\} \begin{array}{l}
 i=1 \dots N \\
 \\
 \end{array}$$

$$\left. \begin{array}{l}
 0 \leq j \leq j_R \\
 \text{et} \\
 i=0
 \end{array} \right\} \Rightarrow f_{0,j}^0 = 1 \quad ; \quad f_{i,j}^0 = 0 \text{ partout ailleurs}$$

La résolution du système se fera par la méthode de balayage.

III Discretisation des équations de transport du combustible, de l'oxydant et de l'énergie:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Y_F}{\partial t} + u \frac{\partial Y_F}{\partial x} + v \frac{\partial Y_F}{\partial r} = D_F \left\{ \frac{\partial^2 Y_F}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_F}{\partial r} \right\} - \frac{1}{\rho} \dot{w}_F \\ \frac{\partial Y_O}{\partial t} + u \frac{\partial Y_O}{\partial x} + v \frac{\partial Y_O}{\partial r} = D_O \left\{ \frac{\partial^2 Y_O}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_O}{\partial r} \right\} - \frac{1}{\rho} \dot{w}_F \\ \frac{\partial T}{\partial t} + u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial r} = a \left\{ \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right\} + \frac{1}{\rho c_p} \Delta H \cdot \dot{w}_F \end{array} \right.$$

Pour discretiser ce système, on utilisera la même méthode que celle utilisée en II. En particulier, les termes de convections seront approximatés par la technique "up Winding" 3^{me} ordre.

La particularité de ce système est l'existence de termes sources dans les seconds membres des équations. Ces termes rendent les équations inter-dépendantes du fait que $\dot{w}_i = \dot{w}(Y, v, T) \dots$

seront connus à chaque résolution et on obtiendra un découplage des 3 équations.

La méthode du paragraphe II sera donc utilisée telle qu'elle pour chaque une des équations du système ci-dessus. Les termes sources $-\frac{1}{P} \dot{W}_{ij}^k$, $-\frac{1}{P} S \dot{W}_{ij}^k$ et $\frac{1}{P C_p} \Delta H \cdot \dot{W}_{ij}^k$ seront additionnés dans les expressions des K_{ij}^k .

Les conditions aux limites seront également introduites de la même manière.

IV Discretisation de l'équation de transport

du gaz neutre :

$$\frac{\partial Y_n}{\partial t} + u \frac{\partial Y_n}{\partial x} + v \frac{\partial Y_n}{\partial r} = D_n \cdot \left\{ \frac{\partial^2 Y_n}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial Y_n}{\partial r} \right\} \quad (4)$$

En la similitude de l'équation (3) du paragraphe II avec l'équation (4), cette dernière sera traitée de la même manière.

LISTING DES PROGRAMMES

LISTE DES IDENTIFICATEURS

Paramètres de discrétisation & dimensions

| | |
|---|----------|
| Pas dans la direction axiale Δx ----- | dx [m] |
| " " " radiale Δr ----- | dr [m] |
| " " le temps Δt ----- | dt [sec] |
| Rayon de l'orifice du jet de fuel R ----- | rr [m] |
| Nombre de subdivision du rayon R ----- | nn |
| Longueur du domaine d'intégration ----- | k2 (xrr) |
| Largeur " " " ----- | k1 (xrr) |

Paramètres physiques

| | |
|--|----------------------------|
| Vitesse moyenne du jet de fuel u_m ----- | um [m/sec] |
| " " " d'air u_m ----- | umm [m/sec] |
| Viscosité cinématique ν ----- | visc [m ² /sec] |
| Masse volumique ρ ----- | rho [Kg/m ³] |
| Chaleur spécifique C_p ----- | cp [Kj/kg/K] |
| Chaleur de réaction ΔH° ----- | h (ou q) [Kj/Kg] |
| Rapport massique f/o stoechio. s ----- | sr |
| Coefficient de diffusion du fuel D_f ----- | df [m ² /sec] |
| " " de l'oxy. D_o ----- | do [m ² /sec] |
| " " du neutre. D_n ----- | dn [m ² /sec] |
| Diffusivité thermique a ----- | dt [m ² /sec] |

Constantes relatives au taux de réaction \dot{W}_f

| | |
|------------------------------------|-------------------------|
| Constante des gaz parfaits r ----- | r [cal/mol/K] |
| Energie d'activation E ----- | qa [cal/mol] |
| Masse molaire du fuel M_f ----- | fmf [kg/mol] |
| " " de l'oxydant ----- | omo [kg/mol] |
| La constante A ----- | ab |
| La constante α ----- | implicitement égale à 1 |

Variables

| | |
|------------------------------|-----------------------------|
| uc(i,j) ----- | Vitesses axiales |
| vc(i,j) ----- | Vitesses radiales |
| yfc(i,j) (ou yf(i,j)) ----- | Fractions massiques du fuel |
| yoc(i,j) (ou yo(i,j)) ----- | " " de l'oxy |
| ync(i,j) ----- | " " du neutre |
| tc(i,j) (ou temp(i,j)) ----- | températures |

Remarque: $u_i(i,j)$, $v_i(i,j)$, $y_{fi}(i,j)$, $y_{oi}(i,j)$, $y_{ni}(i,j)$ et $t_i(i,j)$ sont les même grandeurs que plus haut, à l'instant précédant.

$e(i)$ et $f(i)$ ----- coefficients de balayage
 it ----- incrément dans le temps (k)

Remarque:

Les programmes suivants ne comportent pas de tests de convergence ; la valeur maximale de it nécessaire pour atteindre le régime stationnaire a été fixée par essai.


```

cccccccccccccccc calcul de uc(i,j) ccccccccccccccc
cccccccccccccccc par balayage ccccccccccccccc

```

```

      b=1/dt+2*visc/dr**2
      s=dr**2*b/2/visc
      do 2 i=2,k2*nn+1
      do 3 j=1,k1*nn
      if (j.eq.1) then
        if (i.eq.k2*nn+1) then
          udux=0
          du2x=2*(ui(i-1,j)-ui(i,j))/dr**2
        else
          udux=(ui(i+1,j)-ui(i-1,j))*ui(i,j)/2/dx
          du2x=(ui(i+1,j)-2*ui(i,j)+ui(i-1,j))/dx**2
        endif
        K=visc*du2x-udux+ui(i,j)/dt
        f(1)=K/b
        e(1)=2*visc/b/dr**2
      else
        if (i.eq.k2*nn+1) then
          udux=0
          du2x=2*(ui(i-1,j)-ui(i,j))/dr**2
        else
          udux=(ui(i+1,j)-ui(i-1,j))*ui(i,j)/2/dx
          du2x=(ui(i+1,j)-2*ui(i,j)+ui(i-1,j))/dx**2
        endif

        vdur=(ui(i,j+1)-ui(i,j-1))*va(i,j)/2/dr
        K=visc*du2x-vdur-udux+ui(i,j)/dt
        a=visc*(2*j-1)/2/(j-1)/dr**2
        c=a*(2*j-3)/(2*j-1)
        deno=(b-c*e(j-1))
        if(deno.eq.0)then
          write(*,*)'c'est le deno qui est nul'
          stop
        endif
        f(j)=(k+c*f(j-1))/deno
        e(j)=a/deno
      endif
3     continue
      t=s*k/b
      uc(i,k1*nn+1)=(t+f(k1*nn))/(s-e(k1*nn))
      do 8 j=k1*nn,1,-1
      uc(i,j)=e(j)*uc(i,j+1)+f(j)
8     continue
2     continue

```

```

cccccccccccccccc calcul des vitesses radiales aux milieux cccc
cccccccccccccccc des mailles ccccccccccccccc

```

```

do 5 i=1,k2*nn
do 5 j=1,k1*nn
if (j.eq.1) then
dux=(uc(i+1,j)+uc(i+1,2)-uc(i,1)-uc(i,2))/2/dx
vc(i,j)=-dux*dr*1/4
else
dux=(uc(i+1,j)-uc(i,j))/dx
vc(i,j)=(2*j-3)/(2*j-1)*vc(i,j-1)-dux*2*dr*(j-1)/(2*j-1)
endif
5 continue

```

ccccccccccccccc estimation des vitesses radiales ccccccccccc
 ccccccccccccccc aux noeuds ccccccccccc

```

do 6 i=2,k2*nn+1
do 6 j=2,k1*nn+1
if((j.eq.k1*nn+1).and.(i.eq.k2*nn+1)) then
va(i,j)=vc(i-1,j-1)
elseif (j.eq.k1*nn+1) then
va(i,j)=(vc(i,j-1)+vc(i-1,j-1))/2
elseif (i.eq.k2*nn+1) then
va(i,j)=(vc(i-1,j)+vc(i-1,j-1))/2
else
va(i,j)=(vc(i,j)+vc(i-1,j)+vc(i-1,j-1)+vc(i,j-1))/4
endif
6 continue

```

ccccccccccccccccccccccccccccccccccc reinitialisation ccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

do 7 i=1,k2*nn+1
do 7 j=1,k1*nn+1
ui(i,j)=uc(i,j)
7 continue
9 continue

```

ccccccccccccccccccccccccccccccccccc écriture des résultats ccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

write(3,*)(uc(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
write(4,*)(va(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
stop
end

```


cccccccccccccccccc incrémentation dans le temps ccccccccccccccccccc

```
do 9 it=1,1200
write(*,*) it
```

cccccccccccccccccc calcul de $f_c(i,j)$ par balayage ccccccccccccccccccc

```
a=df/dr**2
c=df/dr**2
b=1/dt+2*df/dr**2
s=dr**2*b/2/df
do 2 i=2,k2*nn+1
do 3 j=1,k1*nn
u=uc(i,j)
if (i.eq.2) then
  udfx=((7*u+3*abs(u))*fi(i-1,j)+(4*abs(u)-8*u)*
* fi(i+1,j)-abs(u)*6*fi(i,j)+(u-abs(u))*fi(i+2,j))/12/dx
elseif (i.eq.k2*nn) then
  udfx=((3*abs(u)-7*u)*fi(i+1,j)-abs(u)*6*
* fi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*fi(i-1,j)-(u+abs(u))*fi(i-2,j))/12/dx
elseif(i.eq.k2*nn+1) then
  udfx=(-(7*u+3*abs(u))*fi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*
* fi(i-1,j)-(u+abs(u))*fi(i-2,j))/12/dx
else
  udfx=((u-abs(u))*fi(i+2,j)+(4*abs(u)-8*u)*fi(i+1,j)-abs(u)*
* 6*fi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*fi(i-1,j)-(u+abs(u))*fi(i-2,j))/12
* /dx
endif
if(j.ne.1) v=va(i,j)-df/((j-1)*dr)
if(j.eq.1) then
  vdfr=0
elseif (j.eq.2) then
  vdfr=((abs(v)-v)*fi(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*fi(i,j+1)+6*abs(v)*
* fi(i,j)-(7*v+3*abs(v))*fi(i,j-1))/12/dr
elseif(j.eq.k1*nn) then
  vdfr=((7*v-3*abs(v))*fi(i,j+1)+6*abs(v)*fi(i,j)-(8*v+4*
* abs(v))*fi(i,j-1)+(v+abs(v))*fi(i,j-2))/12/dr
else
  vdfr=((abs(v)-v)*fi(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*fi(i,j+1)+6*abs(v)*
* fi(i,j)-(8*v+4*abs(v))*fi(i,j-1)+(v+abs(v))*fi(i,j-2))/12/dr
endif
k=fi(i,j)/dt-(-udfx)-vdfr
if (j.eq.1) then
f(1)=k/b
e(1)=2*df/b/dr**2
else
deno=(b-c*e(j-1))
f(j)=(k+c*f(j-1))/deno
e(j)=a/deno
endif
continue
```

```

t=s*k/b
fc(i,k1*nn+1)=(t+f(k1*nn))/(s-e(k1*nn))
do 8 j=k1*nn,1,-1
fc(i,j)=e(j)*fc(i,j+1)+f(j)
8 continue
2 continue

cccccccccccccccc reinitialisation ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

do 7 i=1,k2*nn+1
do 7 j=1,k1*nn+1
fi(i,j)=fc(i,j)
7 continue
8 continue
write(5,*)((fc(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)

cccccccccccccccc calcul de yf(i,j), yo(i,j), temp(i,j) ccccccccccccc

do 14 i=1,k2*nn+1
do 13 j=1,k1*nn+1
if(fc(i,j).ge.1/(sr+1)) then
yf(i,j)=fc(i,j)*(1+1/sr)-1/sr
yo(i,j)=0
temp(i,j)=fc(i,j)*(q/cp+to-tl)+tl-yf(i,j)*q/cp
else
yf(i,j)=0
yo(i,j)=1-fc(i,j)*(sr+1)
temp(i,j)=fc(i,j)*(q/cp+to-tl)+tl
endif
13 continue
14 continue

cccccccccccccccc ecriture des résultats ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

write(6,*)((yf(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
write(7,*)((yo(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
write(8,*)((temp(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)

stop
end

```

```

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
c
c
c          PROGRAMME 'COMBUSTION 2'
c
c      ce programme calcule les temperatures tc(i,j), les concentrations
c      yfc(i,j), yoc(i,j) pour une réaction à vitesse finie.
c      Il nécessite l'existence, des fichiers résultats du programme
c      'VITESSES' (uc.dat et vc.dat) et du programme 'COMBUSTION 1'
c      (yf.dat, yo.dat et temp.dat).
c      Les résultats sont stockés dans les mêmes fichiers.
c
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

```

parameter(df=8.5e-5, do=4.5e-5, dtt=12.e-5)
parameter(rho=0.7, cp=1.2, h=45000, qa=37000, r=1.987, ab=1.e13)
parameter(fmf=16e-3, omo=32e-3, sr=2.)
parameter(rr=2.e-3, k1=6, k2=11)
parameter(nn=5, dt=0.0007)
real k
real uc(56,31), va(56,31), yfc(56,31), yfi(56,31)
real yoi(56,31), yoc(56,31), ti(56,31), tc(56,31)
real e(31), f(31)
aa=ab*rho/fmf/omo
ta=qa/r
open(unit=3, file='uc.dat', status='old')
read(3,*)((uc(i,j), j=1, k1*nn+1), i=1, k2*nn+1)
close(unit=3)
open(unit=4, file='vc.dat', status='old')
read(4,*)((va(i,j), j=1, k1*nn+1), i=1, k2*nn+1)
close(unit=4)
open(unit=5, file='yf.dat', status='old')
open(unit=6, file='yo.dat', status='old')
open(unit=7, file='temp.dat', status='old')
read(5,*)((yfi(i,j), j=1, k1*nn+1), i=1, k2*nn+1)
read(6,*)((yoi(i,j), j=1, k1*nn+1), i=1, k2*nn+1)
read(7,*)((ti(i,j), j=1, k1*nn+1), i=1, k2*nn+1)
dr=rr/nn
dx=dr

```

```

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

```

do 9 it=1,25

```

```

cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

```

calcul de yfc(i,j) par balayage
cccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

a=df/dr**2
c=df/dr**2
b=1/dt+2*df/dr**2
s=dr**2*b/2/df
do 2 i=2, k2*nn+1
do 3 j=1, k1*nn
u=uc(i,j)

```

```

if (i.eq.2) then
  udyfx=((7*u+3*abs(u))*yfi(i-1,j)+(4*abs(u)-8*u)*
* yfi(i+1,j)-abs(u)*6*yfi(i,j)+(u-abs(u))*yfi(i+2,j))/12/dx
  elseif (i.eq.k2*nn) then
    udyfx=((3*abs(u)-7*u)*yfi(i+1,j)-abs(u)*6*
* yfi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*yfi(i-1,j)-(u+abs(u))*yfi(i-2,j))/12/dx
  elseif(i.eq.k2*nn+1) then
    udyfx=(-(7*u+3*abs(u))*yfi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*
* yfi(i-1,j)-(u+abs(u))*yfi(i-2,j))/12/dx
  else
    udyfx=((u-abs(u))*yfi(i+2,j)+(4*abs(u)-8*u)*yfi(i+1,j)-abs(u)*
* 6*yfi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*yfi(i-1,j)-(u+abs(u))*yfi(i-2,j))/12
* /dx
  endif
  if(j.ne.1) v=va(i,j)-df/((j-1)*dr)
  if(j.eq.1) then
    vdyfr=0
  elseif (j.eq.2) then
    vdyfr=((abs(v)-v)*yfi(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*yfi(i,j+1)+6*abs(v)*
* yfi(i,j)-(7*v+3*abs(v))*yfi(i,j-1))/12/dr
  elseif(j.eq.k1*nn) then
    vdyfr=((7*v-3*abs(v))*yfi(i,j+1)+6*abs(v)*yfi(i,j)-(8*v+4*
* abs(v))*yfi(i,j-1)+(v+abs(v))*yfi(i,j-2))/12/dr
  else
    vdyfr=((abs(v)-v)*yfi(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*yfi(i,j+1)+6*abs(v)*
* yfi(i,j)-(8*v+4*abs(v))*yfi(i,j-1)+(v+abs(v))*yfi(i,j-2))/12/dr
  endif
  wr=aa*ti(i,j)*yfi(i,j)*yoi(i,j)*exp(-ta/ti(i,j))
  k=yfi(i,j)/dt-(-udyfx)-vdyfr-wr
  if (j.eq.1) then
    f(1)=k/b
    e(1)=2*df/b/dr**2
  else
    f(j)=(k+c*f(j-1))/(b-c*e(j-1))
    e(j)=a/(b-c*e(j-1))
  endif
  continue
3 t=s*k/b
  yfc(i,k1*nn+1)=(t+f(k1*nn))/(s-e(k1*nn))
  if(yfc(i,k1*nn+1).lt.0) yfc(i,k1*nn+1)=0.
  do 8 j=k1*nn,1,-1
  yfc(i,j)=e(j)*yfc(i,j+1)+f(j)
  if(yfc(i,j).lt.0) yfc(i,j)=0.
8 continue
2 continue

```

cccccccccccccccc calcul de yoc(i,j) par balayage ccccccccccccc

```

a=do/dr**2
c=do/dr**2
b=1/dt+2*do/dr**2
s=dr**2*b/2/do

```

```

do 5 i=2,k2*nn+1
do 4 j=1,k1*nn
u=uc(i,j)
if (i.eq.2) then
  udyox=((7*u+3*abs(u))*yoi(i-1,j)+(4*abs(u)-8*u)*
+ yoi(i+1,j)-abs(u)*6*yoi(i,j)+(u-abs(u))*yoi(i+2,j))/12/dx
elseif (i.eq.k2*nn) then
  udyox=((3*abs(u)-7*u)*yoi(i+1,j)-abs(u)*6*
+ yoi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*yoi(i-1,j)-(u+abs(u))*yoi(i-2,j))/12/dx
elseif(i.eq.k2*nn+1) then
  udyox=(-(7*u+3*abs(u))*yoi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*
+ yoi(i-1,j)-(u+abs(u))*yoi(i-2,j))/12/dx
else
  udyox=((u-abs(u))*yoi(i+2,j)+(4*abs(u)-8*u)*yoi(i+1,j)-abs(u)*
+ 8*yoi(i,j)+(8*u+4*abs(u))*yoi(i-1,j)-(u+abs(u))*yoi(i-2,j))/12
+ /dx
endif
if(j.ne.1) v=va(i,j)-do/((j-1)*dr)
if(j.eq.1) then
  vdyor=0
elseif (j.eq.2) then
vdyor=((abs(v)-v)*yoi(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*yoi(i,j+1)+6*abs(v)*
+ yoi(i,j)-(7*v+3*abs(v))*yoi(i,j-1))/12/dr
elseif(j.eq.k1*nn) then
vdyor=((7*v-3*abs(v))*yoi(i,j+1)+6*abs(v)*yoi(i,j)-(8*v+4*
+ abs(v))*yoi(i,j-1)+(v+abs(v))*yoi(i,j-2))/12/dr
else
vdyor=((abs(v)-v)*yoi(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*yoi(i,j+1)+6*abs(v)*
+ yoi(i,j)-(8*v+4*abs(v))*yoi(i,j-1)+(v+abs(v))*yoi(i,j-2))/12/dr
endif
wr=aa*ti(i,j)*yfi(i,j)*yoi(i,j)*exp(-ta/ti(i,j))
k=yoi(i,j)/dt-(-udyox)-vdyor-wr*omo*sr/fmf
if (j.eq.1) then
f(1)=k/b
e(1)=2*do/b/dr**2
else
f(j)=(k+c*f(j-1))/(b-c*e(j-1))
e(j)=a/(b-c*e(j-1))
endif
4 continue
t=s*k/b
yoc(i,k1*nn+1)=(t+f(k1*nn))/(s-e(k1*nn))
if(yoc(i,k1*nn+1).lt.0) yoc(i,k1*nn+1)=0.
do 10 j=k1*nn,1,-1
yoc(i,j)=e(j)*yoc(i,j+1)+f(j)
if(yoc(i,j).lt.0) yoc(i,j)=0.
10 continue
5 continue

cccccccccccccccccc calcul de tc(i,j) par balayage cccccccccccccc

a=dttdr**2

```

```

e=dt/dt**2
b=1/dt+2*dt/dt**2
s=dr**2*b/2/dt
do 21 i=2,k2*nn+1
do 19 j=1,k1*nn
u=uc(i,j)
if (i.eq.2) then
  udx=((7*u+3*abs(u))*ti(i-1,j)+(4*abs(u)-8*u)*
* ti(i+1,j)-abs(u)*6*ti(i,j)+(u-abs(u))*ti(i+2,j))/12/dx
elseif (i.eq.k2*nn) then
  udx=((3*abs(u)-7*u)*ti(i+1,j)-abs(u)*6*
* ti(i,j)+(8*u+4*abs(u))*ti(i-1,j)-(u+abs(u))*ti(i-2,j))/12/dx
elseif(i.eq.k2*nn+1) then
  udx=(-(7*u+3*abs(u))*ti(i,j)+(8*u+4*abs(u))*
* ti(i-1,j)-(u+abs(u))*ti(i-2,j))/12/dx
else
  udx=((u-abs(u))*ti(i+2,j)+(4*abs(u)-8*u)*ti(i+1,j)-abs(u)*
* 6*ti(i,j)+(8*u+4*abs(u))*ti(i-1,j)-(u+abs(u))*ti(i-2,j))/12
* /dx
endif
if(j.ne.1) v=va(i,j)-dt/((j-1)*dr)
if(j.eq.1) then
  vdtr=0
elseif (j.eq.2) then
vdtr=((abs(v)-v)*ti(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*ti(i,j+1)+6*abs(v)*
* ti(i,j)-(7*v+3*abs(v))*ti(i,j-1))/12/dr
elseif(j.eq.k1*nn) then
vdtr=((7*v-3*abs(v))*ti(i,j+1)+6*abs(v)*ti(i,j)-(8*v+4*
* abs(v))*ti(i,j-1)+(v+abs(v))*ti(i,j-2))/12/dr
else
vdtr=((abs(v)-v)*ti(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*ti(i,j+1)+6*abs(v)*
* ti(i,j)-(8*v+4*abs(v))*ti(i,j-1)+(v+abs(v))*ti(i,j-2))/12/dr
endif
wr=aa*ti(i,j)*yfi(i,j)*yoi(i,j)*exp(-ta/ti(i,j))
k=ti(i,j)/dt-(-udtx)-vdtr+wr*h/cp
if (j.eq.1) then
f(1)=k/b
e(1)=2*dt/b/dr**2
else
f(j)=(k+c*f(j-1))/(b-e*e(j-1))
e(j)=a/(b-e*e(j-1))
endif
19 continue
t=s*k/b
tc(i,k1*nn+1)=(t+f(k1*nn))/(s-e(k1*nn))
do 17 j=k1*nn,1,-1
tc(i,j)=e(j)*tc(i,j+1)+f(j)
17 continue
21 continue

```

cc reinitialisation ccc

```
do 7 i=2,k2*nn+1
do 7 j=1,k1*nn+1
yfi(i,j)=yfc(i,j)
yoi(i,j)=yoc(i,j)
ti(i,j)=tc(i,j)
7 continue
9 continue
```

```
cccccccccccccccccccc écriture des résultats ccccccccccccccccccccc
```

```
write(5,*)((yfi(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
write(6,*)((yoi(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
write(7,*)((ti(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
```

```
stop
end
```



```

do 2 i=2,k2*nn+1
do 3 j=1,k1*nn
u=uc(i,j)
if (i.eq.2) then
udynx=((7*u+3*abs(u))*yni(i-1,j)+(4*abs(u)-3*u)*
* yni(i+1,j)-abs(u)*6*yni(i,j)+(u-abs(u))*yni(i+2,j))/12/dx
elseif (i.eq.k2*nn) then
udynx=((3*abs(u)-7*u)*yni(i+1,j)-abs(u)*6*
* yni(i,j)+(8*u+4*abs(u))*yni(i-1,j)-(u+abs(u))*yni(i-2,j))/12/dx
elseif(i.eq.k2*nn+1) then
udynx=(-(7*u+3*abs(u))*yni(i,j)+(8*u+4*abs(u))*
* yni(i-1,j)-(u+abs(u))*yni(i-2,j))/12/dx
else
udynx=((u-abs(u))*yni(i+2,j)+(4*abs(u)-3*u)*yni(i+1,j)-abs(u)*
* 6*yni(i,j)+(8*u+4*abs(u))*yni(i-1,j)-(u+abs(u))*yni(i-2,j))/12
* /dx
endif
if(j.ne.1) v=va(i,j)-df/((j-1)*dr)
if(j.eq.1) then
vdyrn=0
elseif (j.eq.2) then
vdyrn=((abs(v)-v)*yni(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*yni(i,j+1)+6*abs(v)*
* yni(i,j)-(7*v+3*abs(v))*yni(i,j-1))/12/dr
elseif(j.eq.k1*nn) then
vdyrn=((7*v-3*abs(v))*yni(i,j+1)+6*abs(v)*yni(i,j)-(8*v+4*
* abs(v))*yni(i,j-1)+(v+abs(v))*yni(i,j-2))/12/dr
else
vdyrn=((abs(v)-v)*yni(i,j+2)+(8*v-4*abs(v))*yni(i,j+1)+6*abs(v)*
* yni(i,j)-(8*v+4*abs(v))*yni(i,j-1)+(v+abs(v))*yni(i,j-2))/12/dr
endif
k=yni(i,j)/dt-(-udynx)-vdyrn
if (j.eq.1) then
f(1)=k/b
e(1)=2*df/b/dr**2
else
f(j)=(k+c*f(j-1))/(b-c*e(j-1))
e(j)=a/(b-c*e(j-1))
endif
3 continue
t=s*k/b
ync(i,k1*nn+1)=(t+f(k1*nn))/(s-e(k1*nn))
do 8 j=k1*nn,1,-1
ync(i,j)=e(j)*ync(i,j+1)+f(j)
8 continue
2 continue

```

cccccccccccccccccccc reinitialisation ccccccccccccccccccccccccccccccccccccc

```

do 7 i=1,k2*nn+1
do 7 j=1,k1*nn+1

```

```
7     yni(i,j)=ync(i,j)
8     continue
9     continue
```

```
cccccccccccccccccc  écriture des résultats  ccccccccccccccccccc
```

```
write(5,*)((ync(i,j),j=1,k1*nn+1),i=1,k2*nn+1)
stop
end
```

REFERENCE
BIBLIOGRAPHIQUES

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- 1) AMES W. F.,
Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering
ACADIMIC PRESS; N.Y., 1965
- 2) ASTARITA G.,
Mass Transfert With Chemical Reaction
Elsevier Publishing Company; Amesterdam, 1967
- 3) BELAKHOWSKY S.,
Introduction aux combustibles et la combustion
Technique et Documentation; Paris, 1978
- 4) BRADSHAW P., CEBECI T., WHITELAW J.H.,
Engineering Calculation Methods for Turbulent Flow
ACADEMIC PRESS, 1981
- 5) BULGARELLI U., CASULLI V., GREENSPAN D.,
Pressure Methods for the Numerical Solution of Free
Surface Fluid flows
PINERIDGE PRESS; U.K., 1984
- 6) BYRON BIRD R., WARREN E. STEWART, EDWIN N. LIGHTFOOT
Transport Phenomena
Wiley International Edition, 1960
- 7) CRANK J.,
The Mathematics of Diffusion
OXFORD, 1970
- 8) DE SOETE G.,
Aspects fondamentaux de la combustion en phase gazeuse.
Technip; Paris, 1976
- 9) DE SOETE G.,
Aspects physique et chimique de la combustion.
Technip; Paris, 1976
- 10) FORSYTHE G.E., WASOW, W.R.,
Finite Difference Methods for Partial Differential
Equations.
John Wiley & Sons; N.Y., 1960

- 11) GAYDON A.G.,
Flames, their structure radiation and temperature
Chapman & Hall LTD; London, 1960
- 12) GODOUNOV S., RIABENSKI V.,
Schémas aux différences
Mir; Moscou, 1977
- 13) HABASHI W.G.,
Computational Methods in Viscous Flows, Vol.3
PINERIDGE PRESS; U.K., 1984
- 14) JENSON V.G., JEFFREYS G.V.,
Mathematical Methods in Chemical Engineering
ACADIMIC PRESS, INC., 1977
- 15) LEONTIEV A.,
Théorie des Echanges de Chaleur et de Masse
Mir, Moscou, 1985
- 16) PERTHUIS E.,
La combustion industrielle.
Technip; Paris, 1983
- 17) RICHTMYER R., MORTON K.,
Difference Methods for Initial Value Problems
John Wiley & Sons, 1967
- 18) SCHLICHTING H.,
Boundary Layer Theory
Mc Graw Hill, 1968
- 19) TAILOR C., MORGAN K.,
Computational Techniques in Transient and Turbulent Flow
PINERIDGE PRESS; U.K., 1981
- 20) VAN TIGGELEN ,
Oxydations et Combustions; tome 1 & 2
Publication de l'I.F.P
- 21) WILLIAMS F.A.,
Combustion Theory
Addison-Wesley; London, 1965

