

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**

*Ecole Nationale Polytechnique*



المدرسة الوطنية المتعددة التقنيات  
Ecole Nationale Polytechnique

Département de Génie Mécanique

**Projet de Fin d'Etudes**

Pour l'obtention du diplôme

**D'Ingénieur d'Etat en Génie Mécanique**

*Thème*

*Etude de l'impact de la teneur de l'air en eau  
sur la température et la composition des  
produits de combustion*

Proposé et dirigé par :

M. BENNOUR Hocine  
M.BILEK Amar

Présenté par :

M. KOUFI Lounes

Promotion : Juin 2011

# Dédicaces

*Je dédie ce modeste travail*

*A ma très chère **Mère** et mon très cher **Père***

*A mes chers frères Et mes chères sœurs.*

*A ceux qui m'ont toujours encouragé pour que je réussisse dans mes études*

*A ceux qui ont veillé pour mon bien être*

*A ceux qui m'ont soutenu dans les moments les plus difficiles de ma vie*

*A ceux que j'aime et je respecte infiniment*

*Le jour est venu pour leur dire Merci...*

*A toute la famille KOUFI.*

*A tous mes amis qui ont toujours été présents et qui n'ont ménagé aucun effort pour me bénéficier avec leur aide et leurs suggestions.*

*A tous mes camarades du département de Génie Mécanique.*

## Lounes

# Remerciement

*Tout d'abord, je remercie le bon Dieu de m'avoir donné l'opportunité d'achever mes études supérieures.*

*J'adresse mes vifs remerciements à mon enseignant et promoteur M. H. BENNOUR pour m'avoir guidé avec patience tout au long de ce travail, pour sa disponibilité et son aide, pour ses compétences et ses conseils qui m'ont été précieux.*

*Je tiens à remercier mon co-promoteur M. A. BILEK pour ses conseils.*

*Je tiens à remercier les membres de jury, les enseignants du département Génie Mécanique et tous les enseignants de l'Ecole Nationale Polytechnique qui ont participé à ma formation.*

*Je remercie aussi tous mes amis et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.*

# Résumé

ملخص:

تم الحصول على حل معادلات احتراق الغاز الطبيعي و غاز الميثان بمختلف نسب ترطيب الهواء بفرضية توازن الديناميك الحراري المبسطة ثم عزز باستخدام برنامج "Fluent" CFD لحجرة احتراق ثنائية الأبعاد بنظام مستقر حيث اعتبرنا حالتنا شعلة الانتشار و شعلة الخلط . و أظهرت النتائج انخفاض ملحوظ في درجات الحرارة و انخفاض ملحوظ في انبعاثات أكسيد النيتروجين مع زيادة في معدل الترطيب .

الكلمات المفتاحية : احتراق ؛ حجرة الاحتراق ؛ شعلة الانتشار ؛ شعلة الخلط ؛ انبعاث أكسيد النيتروجين ؛ ترطيب.

## Résumé

La résolution des équations de la combustion du gaz naturel et du méthane avec différents taux d'humidification de l'air a été obtenue sous l'hypothèse très simplificatrice de l'équilibre thermodynamique, puis consolidée à l'aide du logiciel de CFD "Fluent" pour une chambre de combustion bidimensionnelle en régime stationnaire où les deux cas de la flamme de diffusion et de la flamme de pré-mélange ont été considérés. Les résultats obtenus affichent une nette diminution de la température et une nette réduction des émissions des  $NO_x$ , avec l'augmentation du taux d'humidification.

Mots clés : combustion, chambre de combustion, flamme de diffusion, flamme pré-mélangée, émissions des  $NO_x$ , humidification.

## Abstract

The resolution of combustion equations for natural gas and methane with various humidification rates of air was obtained under the simplifying assumption of thermodynamic balance, then consolidated using the software CFD "Fluent" for a two-dimensional combustion chamber in a steady state where the two cases of the diffusion flame and premix flame were considered. The results obtained show a marked decrease in temperature and  $NO_x$  emissions, with the increase in the rate of humidification.

Keywords : combustion, combustion chamber,  $NO_x$  emissions, premix flame, diffusion flame, humidification.



# Table de matières

## TABLE DE MATIERES

<b>INTRODUCTION GENERALE</b> .....	1
<b>CHAPITRE I : NOTION SUR LA COMBUSTION</b>	
1. Phénoménologie de la combustion.....	3
2.2. Mécanisme réactionnel.....	3
2.2.1 Réaction en chaîne.....	3
2.2.2 Réactions d'équilibre.....	5
2.3. Vitesse réactionnelle.....	5
2. Les flammes.....	9
3.1. Flammes de pré-mélange.....	9
3.1.2. Flammes laminaires pré-mélangées.....	9
3.1.3. Flammes turbulentes pré-mélangées.....	10
3.2. Flammes de diffusion.....	11
3. Mécanismes de formation des émissions polluantes.....	14
4.1. Formation des NO <sub>x</sub> .....	14
4.1.1. Le mécanisme thermique.....	14
4.1.2. Le mécanisme précoce.....	14
4.1.3. Le mécanisme impliquant l'azote contenu dans le combustible.....	15
4.2. Formation des oxydes de soufre.....	15
4.2.1. Dioxyde de soufre.....	16
4.2.2. Trioxyde de soufre.....	16
4.3. Formation du monoxyde de carbone.....	16
4. La combustion dans les turbines à gaz.....	17
5.1. La chambre de combustion.....	17
5.2. Techniques de réduction des émissions d'oxydes d'azote.....	18
5.2.1. Défaut/excès d'oxygène.....	18
5.2.2. Réduction de la température de la flamme.....	19
5.2.3. Autres techniques de réduction des émissions de polluants.....	20
5. Instabilité de la flamme.....	21
<b>CHAPITRE II : ETUDE DE L'INFLUENCE DE L'INJECTION D'EAU DANS LES REACTIFS SUR LA TEMPERATURE ET LA COMPOSITION DES PRODUITS A L'EQUILIBRE THEMODYNAMIQUE</b>	
1. Introduction.....	23
2. Combustion du gaz naturel.....	23
2.1. Combustion stœchiométrique.....	24
2.2. Réaction de combustion avec excès d'air.....	24
3. Analyse de la combustion avec dissociation.....	25
4. Equations régissantes.....	26
4.1. Equations d'équilibre chimique.....	26
4.2. Equations de conservation des éléments chimiques.....	27
4.3. Equation du bilan d'énergie.....	28
<b>CHAPITRE III : MODELISATION DES PHENOMENE PRESENTS AU COURS DE LA COMBUSTION</b>	
1. Introduction.....	31
2. Formulation mathématique des équations de la combustion.....	31
2.1. Equation de continuité.....	31

# Table de matières

---

2.2.	Equation de conservation de la quantité de mouvement.....	31	
2.3.	Equation de conservation des espèces.....	32	
2.4.	Conservation de l'énergie.....	33	
3.	Hypothèses générales.....	34	
4.	Formulation des équations de la turbulence.....	35	
4.1.	Introduction à la turbulence.....	35	
4.2.	Modèles de turbulence.....	37	
5.	Modélisation de la turbulence.....	38	
5.1.	Equations de Navier-Stokes moyennées.....	38	
5.2.	Equation de continuité.....	39	
5.3.	Equation de conservation des espèces.....	39	
5.4.	Equation de la quantité de mouvement.....	39	
5.5.	Equation d'enthalpie.....	39	
5.6.	L'équation d'état du gaz parfait moyennée.....	40	
5.7.	Contraintes de Reynolds.....	40	
5.8.	Flux turbulents d'espèces et d'enthalpie.....	40	
6.	Modèle de turbulence $k - \epsilon$ .....	40	
<b>CHAPITRE IV : RESOLUTION DES EQUATIONS DE LA COMBUSTION AVEC INJECTION D'EAU A L'AIDE DU LOGICIEL FLUENT</b>			
1.	Introduction.....	42	
2.	Le solveur.....	42	
3.	Le post-Processing.....	43	
4.	Description du problème.....	44	
5.	Conditions aux limites et maillage.....	44	
5.1.	Flamme de diffusion.....	44	
5.2.	Flamme de pré-mélange.....	45	
<b>CHAPITRE V : RESULTATS ET INTERPRETATION</b>			
1.	Introduction.....	47	
2.	Présentation des résultats des calculs dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique.....	47	
3.	Présentation des résultats des calculs sur "Fluent" pour la combustion du méthane.....	50	
4.	Comparaison.....	53	
<b>CONCLUSION GENERALE.....</b>			<b>55</b>
<b>BIBIOGRAPHIE</b>			
<b>ANNEXE A</b>			
<b>ANNEXE B</b>			
<b>ANNEXE C</b>			

# Liste des figures

---

## Liste des figures

Fig.I.1 : Diagramme schématique des interactions dans une flamme de combustion plane.....	9
Fig.I.2 : Flammes plissées.....	10
Fig.I.3 : Flammes plissées épaisses.....	11
Fig.I.4 : Flammes de diffusion sur-ventilée et sous-ventilée.....	12
Fig.I.5 : Transition entre flammes de diffusion laminaire et turbulente.....	12
Fig.I.6 : Représentation schématique du profil de compositions dans une flamme de diffusion laminaire.....	13
Fig.I.7 : mécanismes de formation des $\text{NO}_x$ .....	15
Fig.I.8 : Les différentes zones de la chambre de combustion.....	18
Fig.I.9 : principe de la combustion étagée.....	19
Fig.I.10 : Performance des différentes méthodes de réduction des $\text{NO}_x$ .....	21
Fig.I.11 : Boucle d'instabilité thermoacoustique.....	21
Fig.III.1 : Cascade d'énergie de Kolmogorov.....	35
Fig.III.2 : Fonction de corrélation de la vitesse.....	36
Fig.III.3: Les différentes approches utilisées pour la simulation de la combustion turbulente.....	38
Fig.IV.1 : Menu du Solveur.....	42
Fig.IV.2 : Organigramme de calcul.....	43
Fig.IV.3 : Opérations du post-processing.....	43
Fig.IV.4 : Géométrie de la chambre de combustion (flamme de diffusion) .....	44
Fig.IV.5 : Géométrie de la chambre de combustion (flamme de pré-mélange) .....	44
Fig.IV.6 : Conditions aux limites (flamme de diffusion) .....	45
Fig.IV.7 : Maillage de la chambre de combustion dans le cas de flamme de diffusion..	45
Fig.IV.8 : Conditions aux limites (flamme de pré-mélange) .....	46
Fig.IV.9 : Maillage de la chambre (flamme pré-mélangée) .....	46
Fig.V.1: Fractions molaires des différents produits et température adimensionnalisées de la combustion du GN à l'équilibre en fonction de la teneur en $\text{H}_2\text{O}$ de l'air de combustion : $\text{H}_2$ , $\text{H}$ , $\text{N}_2$ , $\text{N}$ , $\text{NO}_2$ , $\text{NO}+\text{NO}_2$ , $n_t$ et $T$ .....	48
Fig.V.2 : Fractions molaires adimensionnalisées des différents produits de la combustion du GN à l'équilibre en fonction de la teneur en $\text{H}_2\text{O}$ de l'air de combustion : $\text{CO}_2$ , $\text{CO}$ , $\text{H}_2\text{O}$ , $\text{O}_2$ , $\text{O}$ , $\text{NO}$ et $\text{OH}$ .....	48
Fig.V.3 : Fractions molaires de divers produits de la combustion du GN à l'équilibre en fonction de la température : $\text{CO}_2$ , $\text{CO}$ , $\text{NO}$ , $\text{N}_2$ , $\text{N}$ , $\text{NO}_2$ et $\text{NO}+\text{NO}_2$ .....	49
Fig.V.4 : Distribution des $\text{NO}_x$ dans une chambre de combustion où à lieu la combustion du $\text{CH}_4$ pour différentes teneurs en $\text{H}_2\text{O}$ de l'air de combustion.....	51
Fig.V.5 : Distribution des $\text{NO}_x$ dans une chambre de combustion où à lieu la combustion du $\text{CH}_4$ pour différentes teneurs en eau de l'air de combustion.....	52

## Liste des figures

---

- Fig.V.6 : Profils des températures de flammes de combustion du  $\text{CH}_4$  en fonction de la teneur en  $\text{H}_2\text{O}$  de l'air de combustion pour les flammes d'équilibre, de diffusion et de pré-mélange.....54
- Fig.V.7 : Teneur en  $\text{NO}_x$  des produits de la combustion du  $\text{CH}_4$  en fonction de la teneur en  $\text{H}_2\text{O}$  de l'air de combustion pour les flammes d'équilibre, de diffusion et de pré-mélange.....54

# Liste des tableaux

---

## Liste des tableaux

Tableau I.1 : Energies d'activation.....	8
Tableau II.1 : Composition moyenne du gaz naturel.....	23
Tableau II.2 : Réactions stœchiométriques impliquant les divers constituants du gaz naturel.....	24
Tableau II.3: Réactions de combustion du GN pour différentes teneurs de l'air en eau.....	25
Tableau II.4 : Equations d'équilibre chimique.....	27
Tableau II.5 : Equations de conservation des éléments chimiques.....	27
Tableau II.6 : Equations de conservation des éléments.....	27
Tableau II.7 : enthalpie des réactifs en fonction de la teneur de l'air en vapeur d'eau...28	
Tableau II.8 : Corrélations d'enthalpie.....	29
Tableau III.1 : Energies d'activation, les constantes $A_r^f$ et l'exposant $\beta_r$ de quelques réactions.....	33
Tableau III.2 : Avantages et inconvénient des différentes approches.....	38
Tableau III.3 : Valeurs des constantes du modèle $k - \varepsilon$ .....	41
Tableau IV.1 : Fractions massiques des réactifs.....	45
Tableau IV.2 : Fractions massiques des réactifs.....	46
Tableau V.1 : Température et composition molaire des produits, calculés à l'équilibre pour la combustion du gaz naturel (GN), en fonction de la teneur en H <sub>2</sub> O de l'air de combustion.....	47
Tableau V.2 : Température et composition des produits, calculés à l'équilibre pour le méthane (CH <sub>4</sub> ), en fonction de la teneur en eau de l'air de combustion.....	50
Tableau V.3 : Tableau comparatif des températures et des produits de la combustion du CH <sub>4</sub> en H <sub>2</sub> O et NO <sub>x</sub> en fonction de la teneur en H <sub>2</sub> O de l'air de combustion pour les trois cas considérés : Equilibre ; Flamme de diffusion ; Flamme de pré-mélange.....	53

# Nomenclature

## Nomenclature

$A_r^f$ : Facteur pré-exponentiel	(--)
$C_{p,i}$ : Chaleur spécifique à pression constante	(J.kg <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup> )
$C_{\mu}$ , $C_{\varepsilon 1}$ , $C_{\varepsilon 2}$ , $\sigma_k$ et $\sigma_\varepsilon$ : Constantes du modèle k- $\varepsilon$	(--)
$c$ : Vitesse moyenne d'une particule	(m/s)
$D_{ij}$ : Coefficient de diffusion de l'espèce $i$ dans le mélange	(m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )
$D_i^T$ : Coefficient de diffusion thermique de l'espèce $i$	(m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )
$E$ : Energie d'activation	(cal.kg <sup>-1</sup> )
$e$ : Energie interne	(J.kg <sup>-1</sup> )
$f_p$ : Facteur d'efficacité des collisions	(--)
$H_R$ : Enthalpie des réactifs	(kj.kmol <sup>-1</sup> )
$H_P$ : Enthalpie des produits	(kj.kmol <sup>-1</sup> )
$\bar{h}_f^\circ$ : Enthalpie de formation	(kj.kmol <sup>-1</sup> )
$\overline{\Delta h}$ : Variations d'enthalpies	(kj.kmol <sup>-1</sup> )
$I$ : Tenseur identité	(--)
$K$ : Constante d'équilibre	(--)
$k_r^f$ : Taux direct de la réaction	(--)
$Le$ : Nombre de Lewis	(--)
$l$ : Echelle intégrale de longueur	(g.mol)
$M$ : Masse molaire moyenne d'une espèce	(g/mol)
$N$ : Nombre d'espèces	(--)
$n_t$ : Nombre de mole total des produits	(mol)
$P$ : Pression	(N/m <sup>2</sup> )
$q$ : Flux de chaleur	(J.m <sup>-3</sup> .s)
$R$ : Constante universelle des gaz parfait	(J/(kg K))
$S_l$ : Vitesse de la flamme	(m.s <sup>-1</sup> )
$T$ : Température	(K)
$t$ : temps	(s)
$u$ : vitesse moyenne de l'écoulement	(m.s <sup>-1</sup> )
$u_i$ : Vitesse de l'espèce $i$	(m.s <sup>-1</sup> )
$u_\eta$ : Vitesse de retournement d'un tourbillon de Kolmogorov	(m.s <sup>-1</sup> )
$V_i$ : Vitesse de diffusion	(m.s <sup>-1</sup> )
$V_R$ : vitesse réactionnelle	(mol.s <sup>-1</sup> )
$X_i$ : Fraction molaire	(--)
$Y_i$ : Fraction massique	(--)
$Z_3$ : Fréquence des collisions tri-moléculaires	(s <sup>-1</sup> )
$Z_2$ : Fréquence des collisions bi-moléculaires	(s <sup>-1</sup> )
$Z_s$ : Fréquence de collisions efficaces sur la paroi	(s <sup>-1</sup> )
$Sc_{kt}$ : Nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce $k$	(--)
<b>Lettres grecques</b>	
$\Lambda$ : Libre parcours moyen d'une molécule	(m)

# Nomenclature

---

$\sigma$ : Diamètre moyen d'une particule	(m)
$\vartheta$ : Longueur de la chaîne réactionnelle	(m)
$\tau_c$ : Temps de réaction moyen	(s)
$\alpha$ : Diffusivité thermique	(m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )
$\delta$ : Epaisseur du front de la flamme	(m)
$\delta_t$ : Epaisseur du front de flamme turbulente	(m)
$\rho$ : Masse volumique	(kg/m <sup>3</sup> )
$\Sigma$ : Tenseur des contraintes	(N.m <sup>-2</sup> )
$\mu$ : Viscosité dynamique	(kg.m <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )
$\mu_t$ : Viscosité turbulente	(kg.m <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )
$\omega_i$ : Taux de production	(kg.m <sup>-1</sup> .s <sup>-1</sup> )
$\nu$ : Viscosité cinématique	(m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )
$k$ : Energie cinétique de la turbulence	(m <sup>2</sup> .s <sup>-2</sup> )
$\varepsilon$ : Taux de dissipation de l'énergie	(m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )
$\lambda$ : Conductivité thermique	(W.m.K <sup>-1</sup> )
$\tau_\eta$ : Temps de retournement d'un tourbillon	(s)
$\eta$ : Echelle de Kolmogorov	(m)
$\beta_r$ : Exposant de la température	(--)

## Abréviations

GN : Gaz Naturel  
DNS : Direct Numerical simulation  
RaNS : Reynolds averaged Navier-Stokes equations  
LES : Large Eddy Simulation  
RSM : Reynolds Stress Model  
CFD : Computational Fluid Dynamic

## Indices

i : Espèce  
r : Réaction  
p : A pression constante  
 $\eta$  : De l'échelle de Kolmogorov  
t : Turbulente

## Exposants

' : Fluctuation (moyenne de Reynolds)  
" : Fluctuation (moyenne de Favre)  
- : Moyenne de Reynolds  
~ : Moyenne de Favre  
T : Transposée

# Introduction générale

---

## Introduction générale

Malgré que les énergies renouvelables se présentent comme des solutions prometteuses, les combustibles fossiles constituent encore la principale source d'énergie et actuellement, leur utilisation reste incontournable. En dépit de cette large utilisation, les constructeurs doivent se plier aux conventions internationales, aussi strictes qu'elles soient, comme celle de Kyoto fixant les limites d'émissions toxiques provoquées par ces combustibles fossiles.

Afin d'aboutir à des solutions à la fois efficaces et opérationnelles, préventives et curatives aux problèmes liés à la combustion, les mondes industriel et de la recherche scientifique doivent s'entraider.

Par ailleurs, la qualité de la fabrication a besoin d'être soutenue par une conception approfondie basée sur la limitation des risques qu'encourent les procédés de combustion.

L'objectif principal des recherches en combustion est de mieux comprendre les phénomènes complexes qui entrent en jeu pour pouvoir les modéliser. En d'autres mots, arriver à simuler numériquement le processus. Cependant, les coûts de développement d'un prototype sont extrêmement lourds. Ils pourraient être sensiblement réduits en optimisant le foyer par simulation numérique avant de construire un prototype aussi proche que possible du produit final. Cette optimisation peut se faire suivant différents critères à savoir : rendement maximal, moindres émissions polluantes,...etc. Il s'agit aussi d'éviter ou de contrôler l'apparition d'instabilités de combustion (dégagement de chaleur et champ acoustique qui conduit à de fortes oscillations des caractéristiques du système, augmentant les bruits et les transferts de chaleur, destruction rapide de l'installation,...etc).

Depuis quelques années, la turbine à gaz remporte un important succès dans le domaine de la production de l'électricité. Cependant, les préoccupations écologiques liées à la réduction des émissions polluantes imposent une réglementation de plus en plus stricte. Ceci n'est guère compatible avec la croissance du rendement de ces machines, obtenue en augmentant le taux de compression et la température de flamme et par conséquent les émissions d'oxydes d'azote. Dans ces conditions, le recours à de nouvelles techniques de combustion est indispensable pour mettre au point des installations affichant de hauts rendements tout en visant à respecter les normes de pollution en vigueur.

Parmi ces techniques, il y a la combustion en milieu humide très prometteuse sur le double plan de l'amélioration des performances de la turbine à gaz et de la réduction des taux d'émissions de polluants atmosphérique, notamment les  $\text{NO}_x$ . En effet, lorsqu'on ajoute de l'eau dans l'air de combustion, la température d'équilibre des produits de combustion diminue et ceci s'accompagne d'une baisse de la formation des  $\text{NO}_x$ . Une telle pratique remonte aux années 60, mais alors les taux d'injection d'eau étaient très faible et avaient pour unique but de réduire les taux d'émission des  $\text{NO}_x$ , et cela concernait exclusivement les turbines aéronautique. Aujourd'hui, la situation a



# Introduction générale

---

beaucoup évolué pour la turbine à gaz qui a réalisée des progrès extraordinaires dans tous les domaines ; notamment dans celui des matériaux qui lui permet d'opérer dans des conditions de plus en plus sévères et des techniques de combustion qui permettrait l'émergence d'une nouvelle génération de centrales électriques dont le rendement tournerait autour de 65% [18].

Dans la présente étude, nous nous fixons pour objectif d'analyser l'influence de l'injection d'eau dans l'air de combustion sur la température de la flamme et la composition des produits, notamment l'évolution de leur concentration en  $\text{NO}_x$ . Nous admettrons dans cette analyse que toutes les précautions sont prises pour garantir la stabilité de la flamme étant donnée la complexité des phénomènes qui s'associent dans les problèmes de combustion, nous nous limiterons dans le cadre de cette modeste étude à l'analyse de la combustion dans les conditions d'équilibre thermodynamique, puis nous ferons une comparaison des résultats avec ceux obtenus avec l'aide du logiciel "*Fluent*".

L'étude commencera par un bref rappel sur la combustion et ses caractéristiques au chapitre (I) ; le chapitre (II) sera consacré à l'analyse de l'influence de l'injection d'eau sur la combustion du gaz naturel dans le cadre de l'équilibre thermodynamique qui permet de simplifier considérablement le modèle mathématique à résoudre. Au chapitre (III), présenterons les équations générales décrivant les phénomènes impliqués dans la combustion, puis au chapitre (IV), nous effectuons une application sur "*Fluent*" pour établir les profils des températures et des concentrations en  $\text{NO}_x$  dans une chambre de combustion bidimensionnel où deux cas seront considérés : cas d'une flamme de diffusion et cas d'une flamme de pré-mélange.

Les résultats de l'étude seront présentés, interprétés et comparés au chapitre (V).

Chapitre I  
**Notions sur la combustion**

Dans ce chapitre, nous allons introduire les notions essentielles qui interviennent dans la description des phénomènes qui apparaissent lors de la combustion. Nous allons également décrire la flamme qui résulte des dégagements de chaleur qui accompagne la combustion et qui dépend de la manière dont le combustible et le comburant sont amenés à se mélanger. Ensuite, nous parlerons de la combustion dans les turbines à gaz et nous finirons par un rappel sur les problèmes d'instabilité associés au développement de la flamme.

## 1. Phénoménologie de la combustion

### 1.1. Mécanisme réactionnel

L'expression globale d'une réaction chimique n'explique pas réellement le mécanisme réactionnel, puisqu'en réalité, chaque réaction qui met en jeu plus de deux partenaires à la fois se fait à partir d'étapes élémentaires.

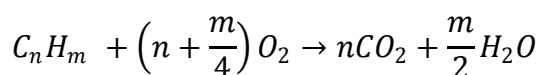
Dans la combustion, ces étapes font intervenir non seulement des molécules stables, mais également des radicaux libres. De plus, elles se succèdent de façon à former des chaînes caractéristiques par une régénération continue de radicaux libres. Ceci permet la transformation d'une énorme quantité de réactifs initiaux grâce à un petit nombre de radicaux. Ensuite, parce que la réactivité chimique de ces radicaux est très forte, il en résulte une vitesse réactionnelle très élevée. Enfin, ces radicaux peuvent aussi se multiplier, ce qui augmentera le nombre de chaînes réactionnelles et par la suite la vitesse. Cet emballement de la vitesse constitue le fait le plus caractéristique de ce qu'on appelle l'explosion.

On appelle radical libre toute molécule qui possède un électron de valence.

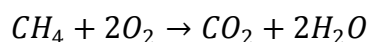
Toute étape élémentaire faisant intervenir des radicaux libres obéit à la règle de parité des variations du nombre de ces radicaux. La différence entre le nombre de radicaux formés et disparus dans une étape élémentaire est égale à un nombre pair ou à zéro.

#### 1.1.1. Réaction en chaîne

Considérons la combustion complète d'un hydrocarbure de formule chimique fictive  $C_nH_m$  suivante :

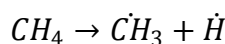


Décrivons le mécanisme réactionnel du méthane dont la réaction globale s'écrit :



En dépit de la simplicité de la molécule du méthane, sa combustion suivant la formule globale exigerait la rencontre de 3 molécules dont le mécanisme est le suivant :

#### A. Initiation

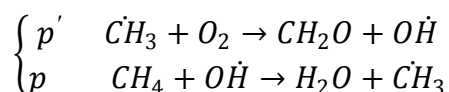


Cette étape d'initiation a pour rôle de créer un très petit nombre de radicaux ( $\dot{C}H_3$  et  $\dot{H}$ ). Une fois le mécanisme initié, la réaction nécessite un apport d'énergie qui

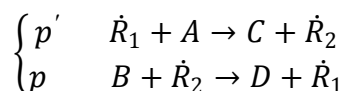
# Chapitre I

peut être d'origine thermique, photonique ou autre, pour se propager et créer d'autres radicaux.

## B. Propagation de la chaîne



ou encore d'une façon générale :

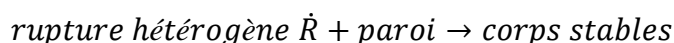
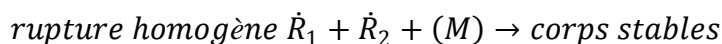


On remarque qu'après cette étape de propagation, le bilan total fait bien réapparaître les produits de la réaction globale du méthane, car l'oxydation du formaldéhyde ( $CH_2O$ ) donnera une molécule de dioxyde de carbone  $CO_2$  et une autre molécule d'eau  $H_2O$ .

Les radicaux  $\dot{C}H_3$  et  $O\dot{H}$  régénérés dans la réaction p et p' peuvent participer à de nouveaux maillons de propagation un nombre indéfini de fois, ce qui fait avancer la combustion.

## C. Terminaison de la chaîne

Les chaînes risquent de se rompre suite à l'apparition d'une étape dite de rupture qui fait disparaître les radicaux libres  $\dot{C}H_3$  ou  $O\dot{H}$ . La rupture peut avoir lieu ou en phase homogène ou en phase hétérogène quand un radical vient heurter la paroi.

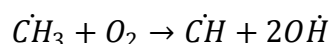


## D. Ramification de la chaîne

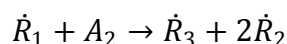
Au cours du processus de combustion, d'autres étapes peuvent se produire également, mais avec une vitesse réactionnelle plus élevée, ce qui fait augmenter le nombre de radicaux libres. Chacun des nouveaux radicaux créés est susceptible d'accomplir le maillon de propagation, de sorte que la chaîne principale est enrichie par des chaînes latérales de propagation.

La ramification de la chaîne peut se faire de deux façons différentes :

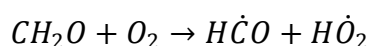
**Ramification directe :** Elle se fait à partir de l'un des réactifs primitifs :



Soit encore de façon générale :



**Ramification indirecte :** Elle se fait à partir d'une espèce intermédiaire élaborée par les étapes élémentaires de propagation.



ou encore :  $C + A \rightarrow 2\dot{R}$

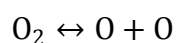
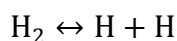
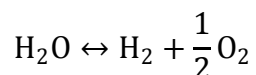
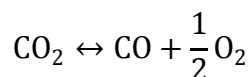
# Chapitre I

---

Ces réactions de ramification jouent un rôle important dans l'auto-inflammation des hydrocarbures.

## 1.1.2. Réactions d'équilibre

A haute température, les gaz sont le siège de réactions d'équilibre, qui se déplacent dans un sens ou dans l'autre suivant la température et la réaction. A la température d'équilibre, ces réactions sont les suivantes :



Le refroidissement brusque dû soit aux échanges avec les parois, soit à la détente brutale dans les moteurs, gèlera la composition des produits qui restera la même à basse température. En effet, la réaction ne pourra pas se produire ou plutôt elle s'opérera à vitesse infiniment lente car les constantes d'équilibre sont des fonctions exponentielles de la température, sauf en présence d'un catalyseur, le platine en général. Par exemple, la combustion ne sera pas complète même en présence d'un excès d'air, il y aura une présence importante de CO, NO, ....., H<sub>2</sub>. Dans les moteurs, les pots catalytiques d'échappements permettent de recombinaison à basse température le NO en N<sub>2</sub>, le O<sub>2</sub> et H<sub>2</sub> en eau et le CO en CO<sub>2</sub>.....

## 1.2. Vitesse réactionnelle

La vitesse réactionnelle s'exprime par la variation de la concentration de l'un des réactifs initiaux ( $X_r$ ) ou de l'un des produits finaux ( $X_p$ ) de la réaction par unité du temps, elle est exprimée par :

$$V_R = -\frac{dX_r}{dt} = \frac{dX_p}{dt}$$

Le signe (-) est dû à la consommation des réactifs.

Si l'on se reporte aux étapes élémentaires de la réaction, la vitesse réactionnelle de chacune d'elles peut être explicitée de la façon suivante :

Soient ( $Z_2$ ) et ( $Z_3$ ) le nombre de collisions bi-particulaires et tri-particulaires respectivement, par unités de temps et de volume. Désignons par  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\delta$  les probabilités pour qu'une telle collision soit suivie respectivement par une propagation, une rupture ou une ramification de chaîne. La probabilité pour qu'une collision donne lieu à une réaction chimique est donc égale à la somme  $\alpha + \beta + \delta$ .

Reprenons l'exemple de la combustion du méthane, avec ces considérations, les vitesses réactionnelles des étapes élémentaires deviennent :

# Chapitre I

## A. Etape de propagation

La vitesse réactionnelle de l'étape  $p$  ( $B + \dot{R}_2 \rightarrow D + \dot{R}_1$ ) est donnée par la relation :

$$V_P = f_p Z_2 X_{\dot{R}_2} X_B \exp\left(-\frac{E_p}{R\theta}\right)$$

avec :

$$Z_2 = \frac{c}{\Lambda} + \frac{T_0 P (8R)^{\frac{1}{2}}}{\Lambda_0 P_0 (\pi M T)^{\frac{1}{2}}} : \text{Fréquence des collisions bi-moléculaires (s}^{-1}\text{)}$$

$T_0$  et  $P_0$  : Température et pression standard.

$\Lambda$  : Libre parcours moyen d'une molécule et  $\Lambda_0$  sa valeur aux conditions normales

$$\Lambda = \frac{T P_0}{T_0 P} \Lambda_0$$

$R$  : Constante universelle des gaz parfait

$M$  : Masse molaire moyenne d'une espèce

$c$  : Vitesse moyenne d'une particule

$$c = \left(\frac{8 R T}{\pi M}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$X_{\dot{R}_2}$  : Probabilité que l'un des partenaires de la réaction soit  $R_2$

$X_B$  : Probabilité que l'autre partenaire soit le corps  $B$

$f_p$  : Facteur d'efficacité des collisions

$\exp\left(-\frac{E_p}{R\theta}\right)$  : Facteur d'Arrhénius

Si l'on désigne par  $p_{\dot{R}}$  la pression partielle des radicaux, en multipliant et divisant par  $p_{\dot{R}}$ , on aura:

$$V_P = f_p Z_2 X_{\dot{R}_2} X_B \exp\left(-\frac{E_p}{RT}\right) \quad (s^{-1})$$

ou encore :

$$V_P = Z_2 \alpha X_{\dot{R}}$$

avec :

$$\alpha = f_p X_{\dot{R}_2} X_B X_{\dot{R}}^{-1} \exp\left(-\frac{E_p}{R\theta}\right) f$$

et  $X_{\dot{R}}$  : Fraction molaire totale de tous les radicaux

De même, on déduit la vitesse réactionnelle de l'étape de propagation  $p'$  :

$$V_{P'} = f_{p'} Z_2 X_{\dot{R}_1} X_A \exp\left(-\frac{E_{p'}}{RT}\right) = Z_2 \alpha' X_{\dot{R}}$$

# Chapitre I

avec  $\alpha' = f_p' X_{R_1} X_A X_R^{-1} \exp\left(-\frac{E_p'}{R\theta}\right) f$

## B. Etape de ramification

Elle se déduit de la même façon que précédemment :

$$V_r = f_r Z_2 X_{R_1} X_{A_2} \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right)$$

Soit encore :

$$V_r = Z_2 \delta X_R$$

avec :

$$\delta = f_r X_{R_1} X_{A_2} X_R^{-1} \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right)$$

## C. Etape de rupture homogène

La rupture de la chaîne en phase homogène constitue une recombinaison de deux radicaux. Ces réactions sont très exothermiques et l'énergie libérée suffirait à dissocier les corps stables formés comme produits de réaction. En revanche, ce dernier présente un nombre d'atomes suffisant pour absorber cette énergie sous forme d'énergie vibrationnelle, la présence d'un troisième corps sera nécessaire pour drainer cette énergie ; ceci est d'ordinaire dans le cas des radicaux présents dans les flammes.

La vitesse de la rupture en phase homogène est donnée par la relation suivante :

$$V_t = f_t Z_3 X_R^2 \exp\left(-\frac{E_t}{RT}\right)$$

où  $Z_3$  est la fréquence des collisions tri-moléculaires, sa valeur est environ mille fois plus faible que celle des collisions bi-particulaires [2].

$$Z_3 = Z_2 \frac{\sigma}{\lambda}$$

avec :  $\sigma$  : Diamètre moyen d'une particule.

$\lambda$  : Libre parcours moyen d'une particule.

On peut écrire :

$$V_t = f_t Z_2 X_R^2 \frac{\sigma}{\lambda} \exp\left(-\frac{E_t}{RT}\right)$$

Vu la grande thermicité de ces réactions, l'énergie d'activation est nulle.

Soit encore :

$$V_t = Z_2 \beta X_R$$

avec :

$$\beta = f_t \frac{\sigma}{\lambda} \exp\left(-\frac{E_t}{RT}\right)$$

## D. Vitesse de rupture sur paroi

En désigne par  $Z_s$  la fréquence de collisions efficaces sur la paroi, la vitesse de rupture hétérogène s'écrit :

$$V_s = Z_s X_r$$

ou encore :

$$V_s = Z_2 \beta_s X_r$$

avec :  $\beta_s = \frac{Z_s}{Z_2}$

## Vitesse de la réaction globale

Dans un dispositif en chaîne, la réaction globale de combustion se fait après chaque maillon de la chaîne, la vitesse globale de combustion ( $V_R$ ) est égale à la vitesse de propagation :

$$-\frac{dX_B}{dt} = V_R = V_P = Z_2 \alpha X_R$$

La vitesse réactionnelle globale étant proportionnelle à la fraction molaire des radicaux libres, elle s'accélère avec l'augmentation de cette fraction molaire, c'est-à-dire aussi longtemps que  $\delta$  reste supérieur à la somme  $\left(f_t \frac{\sigma}{\lambda} X_R + \beta_s\right)$ . D'autre part, la réaction globale de la combustion étant exothermique, son accélération correspond d'ordinaire à une augmentation de la température, c'est le deuxième intérêt de l'accélération de  $V_R$ . Cette auto-accélération mène rapidement à un emballement de la vitesse réactionnelle, qui constitue l'explosion.

## Longueur de la chaîne réactionnelle

La longueur de la chaîne est définie par le rapport de la vitesse réactionnelle globale et la vitesse nette de production des radicaux :

$$\vartheta = \frac{V_R}{V_{nette}} = \frac{V_R}{V_r - V_t - V_s} = \frac{\alpha}{\delta - \beta - \beta_s}$$

Le tableau suivant présente les énergies d'activation de certaines étapes élémentaires :

**Tableau I.1 : Energies d'activation [6]**

Réactions	Energie d'activation (Kcal/mol)
$\dot{C}H_3 + CH_3 - CH_3 \rightarrow CH_3 - \dot{C}H_2 + CH_4$	10,4
$\dot{O}H + H_2 \rightarrow H_2O + \dot{H}$	5
$\dot{O}H + CO \rightarrow CO_2 + \dot{H}$	3
$\dot{O}H + CH_4 \rightarrow \dot{C}H_3 + H_2O$	9
$\dot{H} + O_2 \rightarrow \dot{O}H + O$	18
$CH_2\dot{O} + O_2 \rightarrow H\dot{C}O + H\dot{O}_2$	35



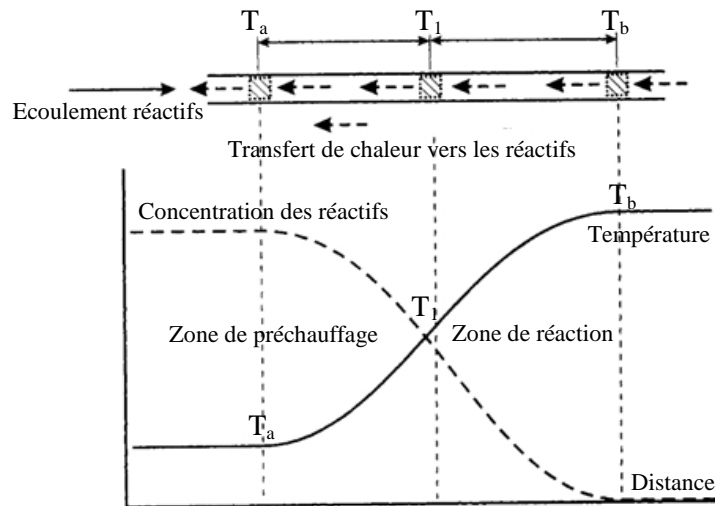
## 2. Les flammes

Une flamme est le dispositif par lequel la combustion des hydrocarbures a lieu avec de l'air. C'est la région où se produit la rupture des molécules du combustible. On a deux types de flammes différents :

- Flammes de pré-mélange.
- Flammes de diffusion.

### 2.1. Flammes de pré-mélange

Les flammes de pré-mélange se produisent dans tout les mélanges combustible/comburant, par exemples la flamme d'un bec Bunsen. Elles peuvent se propager suivant un procédé de déflagration ou un procédé de détonation. Les flammes de pré-mélange se subdivisent en flammes laminaires et flammes turbulentes.



**Fig.I.1 : Diagramme schématique des interactions dans une flamme de combustion plane [7].**

#### 2.1.1 Flammes laminaires pré-mélangées

Ce type de flammes, moins naturel, impose un mélange combustible/comburant homogène qui favorise l'apparition d'une réaction chimique exothermique. Cette réaction complexe met en jeu des étapes intermédiaires où l'on observe la présence d'espèces radicalaires. Ces radicaux vont être émis dans le mélange, qui se trouve à proximité, prêt à réagir. Il en va de même pour la chaleur dégagée par cette réaction d'initiation. Ainsi, la présence d'espèces radicalaires permet la diminution de l'énergie d'activation globale du mécanisme réactionnel et l'augmentation de la température. La zone d'interface dans laquelle se produisent la combustion et les phénomènes de diffusion thermiques et moléculaires est dite front de flamme. Ce dernier se propage donc dans les gaz frais et les transforme en gaz brûlés.

#### Vitesse de propagation d'une flamme dans un mélange laminaire

Il existe plusieurs types d'approches pour estimer la vitesse de propagation. Parmi elles, on peut citer celle de Mallard et Lechâtelier (1883), ainsi que l'extension qui lui a été apportée par Zeldovich, Franck-Kamneski et Semenov (1938), qui ont démontré que

# Chapitre I

la vitesse de la flamme ( $S_l$ ) est proportionnelle à la racine carrée du rapport de la diffusivité thermique ( $\alpha$ ) sur le temps de réaction moyen ( $\tau_c$ ).

$$S_l \sim \sqrt{\frac{\alpha}{\tau_c}}$$

avec :

$$\tau_c = \frac{1}{\bar{w}}$$

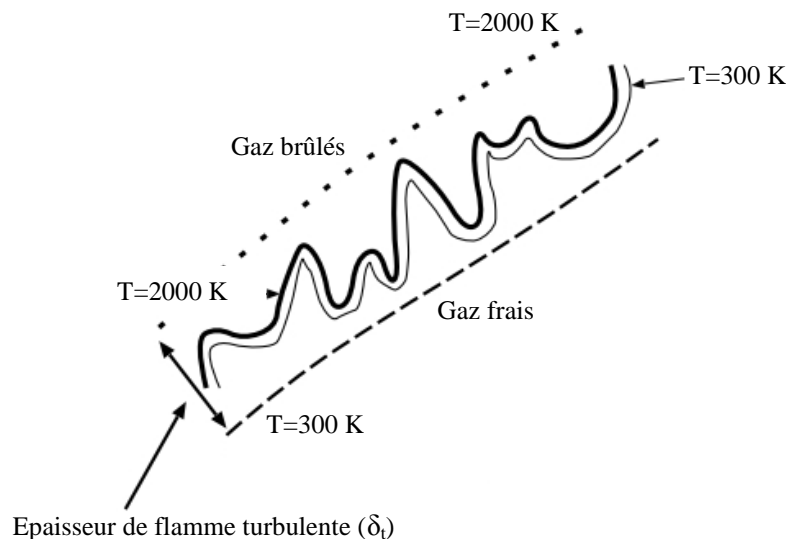
où  $\bar{w}$  est le taux de réaction moyen.

L'épaisseur du front de flamme est quant à elle donnée par :

$$\delta \sim \sqrt{\frac{1}{2} \tau_c \alpha}$$

## 2.1.2 Flammes turbulentes pré-mélangées

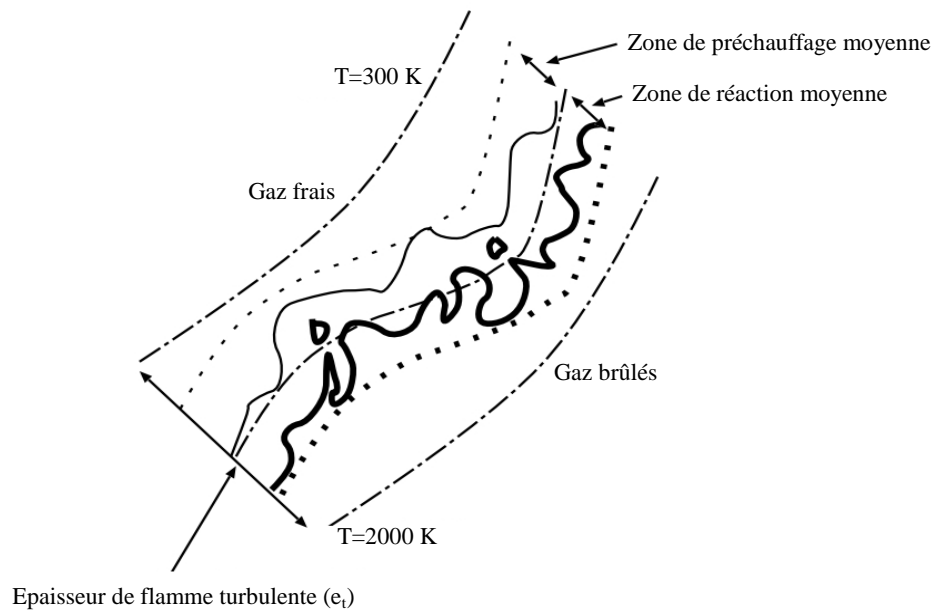
Comme nous l'avons vu, les caractéristiques d'une flamme laminaire pré-mélangée sont liées aux diffusivités moléculaire et thermique. La turbulence affecte donc ces caractéristiques de façon remarquable puisqu'elle favorise les phénomènes de transport. De plus, la surface de la flamme sera grande et également la variation de la vitesse. Lorsque les échelles de la turbulence sont toutes grandes, le front de flamme s'enroule autour de ces structures sans se modifier à l'intérieur. Le régime de combustion ainsi obtenu s'appelle flamme turbulente (**Fig.I.2**).



**Fig.I.2 : Flammes plissées [1].**

Lorsque l'échelle de kolmogorov, la plus petite de l'écoulement turbulent, est inférieure à l'épaisseur de la flamme ( $\delta_t$ ), la structure interne de la flamme commence à être modifiée. Des interactions entre les flammelles voisines se produisent très fréquemment vu que leur rayon de courbure devient du même ordre de grandeur de ( $\delta_t$ ). Dans le cas où ces flammelles fusionnent, l'épaisseur augmente localement. Cependant, l'étirement local réduit cette épaisseur en d'autres endroits. A présent, si l'on

augmente l'énergie de turbulence  $k$  en gardant la même échelle intégrale  $\Lambda$ , on obtient un front de flamme non-courbé et très épais (supérieur à  $\delta_t$ ). Cette flamme est le résultat de très nombreux débordements du front de flamme (**Fig.I.3**).

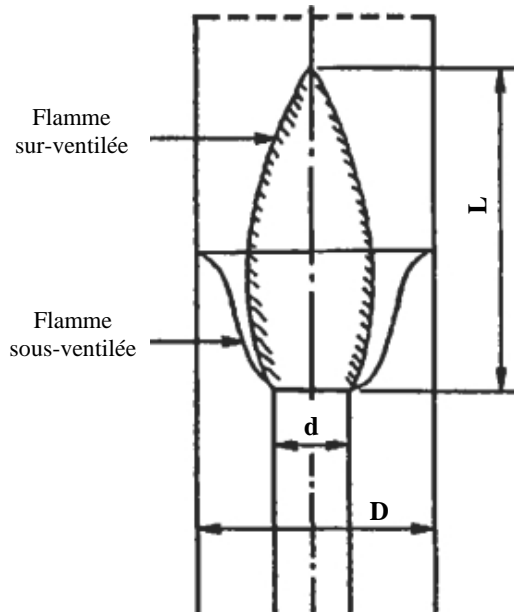


**Fig.I.3 : Flammes plissées épaisses [1].**

## 2.2. Flammes de diffusion

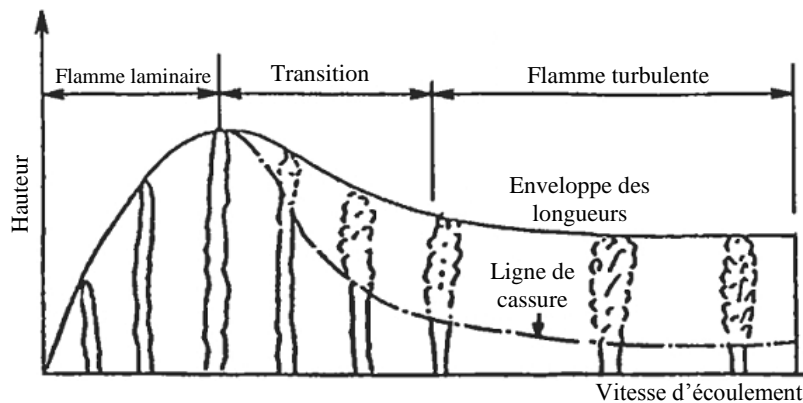
La vitesse de propagation des flammes laminaires de pré-mélange est déterminée par la vitesse des réactions d'oxydation dans le front de flamme lui-même, puis en second lieu, par les vitesses de diffusion et de transfert de chaleur entre les gaz en combustion et les gaz frais. La propagation des flammes de diffusion est gouvernée principalement par les phénomènes d'inter-diffusion (moléculaire ou turbulente) du combustible et du comburant, qui ne se trouvent pas mélangés au préalable. Ces deux phénomènes (réaction chimique et diffusion) sont régis par les collisions intermoléculaires qui, d'une part, s'opposent à la progression les unes vers les autres des espèces gouvernantes, mais qui, d'autre part, permettent aux réactions de se produire. Plus précisément, les vitesses de diffusion et de réaction sont respectivement proportionnelle et inversement proportionnelle au libre parcours moyen  $\lambda$ .

La manière la plus simple de réaliser une flamme de diffusion est d'allumer un jet de combustible issu d'un tube débouchant dans une atmosphère infinie de comburant au repos (**Fig.I.4**). L'aspect de ces flammes, pour un diamètre de brûleur donné, dépend du débit de combustible. A faible débit, la hauteur de la flamme augmente uniformément avec la vitesse moyenne de l'écoulement. Toutefois, à partir d'une vitesse critique de l'écoulement, la hauteur diminue pour atteindre une valeur quasi constante jusqu'au moment où se produit le soufflage et l'extinction de la flamme.



**Fig.I.4 : Flammes de diffusion sur-ventilée et sous-ventilée [7].**

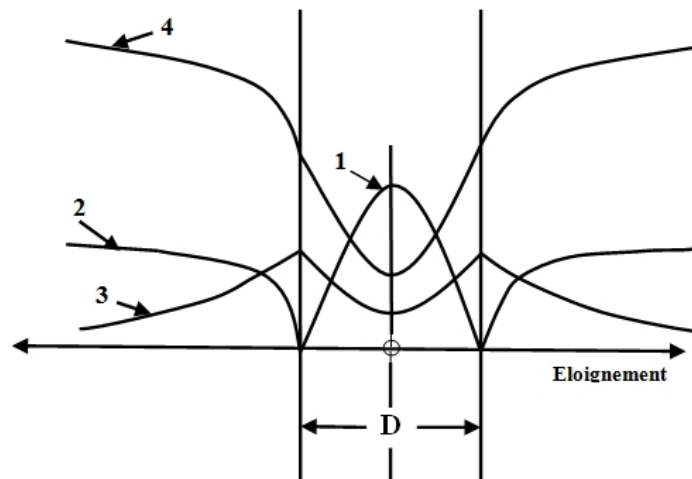
La première région de la représentation schématique de la figure (I.5) correspond au régime laminaire des flammes de diffusion, entre la vitesse d'écoulement où la hauteur de la flamme commence à décroître et celle où elle atteint une valeur constante, le système traverse un régime de transition vers le régime turbulent, complètement établi dans la troisième région. Dans le régime intermédiaire de transition, on constate que seule la partie supérieure de la flamme présente des structures propres à la turbulence. Une telle structure se manifeste alors par le développement de tourbillons engendrés à la surface fictive de séparation entre le jet et l'atmosphère ambiante. Les flammes de diffusion dont il vient d'être question sont des flammes accrochées sur l'orifice du brûleur. Se superposant au domaine d'existence de ces dernières, il existe un domaine de stabilité de flammes suspendues dont la base se trouve nettement au-dessus de l'orifice du tube ; à partir d'un certain débit, il y a donc décrochage de la flamme. Les flammes de diffusion suspendues sont toujours turbulentes, mais si l'écoulement à l'intérieur du tube est encore laminaire ; la turbulence est créée par les forces de cisaillement entre le jet en mouvement et l'atmosphère dans laquelle il pénètre.



**Fig.I.5 : Transition entre flammes de diffusion laminaire et turbulente [7].**

# Chapitre I

La zone de réaction d'une flamme de diffusion est plus étalée ou épaisse que celle d'une flamme de pré-mélange, de plus elle constitue une transition d'une région contenant le combustible vers une région contenant le comburant. La réaction chimique s'étale sur toute une région de l'espace dans laquelle la richesse passe progressivement d'une valeur très élevée à une valeur très faible ; d'un bout à l'autre la réaction génère une certaine quantité de produits de combustion, qui à leur tour diffusent de part et d'autre vers le comburant et le combustible. Il en résulte que le profil de concentration des diverses espèces chimiques sera très différent de ce qu'il est dans les flammes de pré-mélange. Ces profils peuvent être calculés à partir des équations de conservation de la masse, de quantité de mouvement et d'énergie, jointes à l'équation de diffusion. De tels profils sont représentés schématiquement à la figure (I.6). La température suit une évolution d'allure analogue à celle de la teneur en produits de combustion ; le maximum doit essentiellement correspondre à la région de l'espace où le mélange est en proportion stœchiométrique et on observe effectivement qu'en cet endroit elle est pratiquement égale à la température de la flamme de pré-mélange de composition stœchiométrique réalisée avec le même rapport combustible/comburant.



**Fig.I.6 : Représentation schématique du profil de compositions dans une flamme de diffusion laminaire [2].**

Les courbes 1 2 3 et 4 représentent de façon schématique respectivement les fractions molaires en combustible, en oxygène, en produits et diluant (azote) le long d'un rayon  $r$  et à une hauteur déterminée au-dessus d'un brûleur cylindrique.

La présence des points anguleux découle de l'hypothèse suivant laquelle la zone de réaction n'aurait aucune épaisseur ; en fait, tenant compte de l'épaisseur réelle, les courbes seraient arrondies.

L'intérêt pratique des flammes de diffusion en régime laminaire est assez réduit. Il se limite aux flammes de bougies ou de lampes à pétrole. Par contre, les flammes de diffusion turbulentes sont à la base de nombreux systèmes de conversion d'énergie chimique en chaleur. L'influence de la turbulence sur la structure de la flamme de diffusion est d'intensifier l'inter-diffusion du combustible et du comburant, en opérant une interpénétration de particules fluides provenant du côté combustible dans la région de comburant et inversement ; ceci conduit à une augmentation considérable de la

surface de contact entre le combustible et le comburant, favorisant l'inter-diffusion des réactifs à l'échelle moléculaire qui est la condition de la réaction.

## 3. Mécanismes de formation des émissions polluantes

### 3.1. Formation des $NO_x$

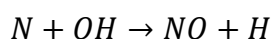
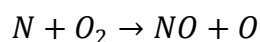
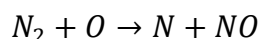
Le monoxyde et le dioxyde d'azote ( $NO$  et  $NO_2$ ) sont les principaux oxydes d'azote ( $NO_x$ ) émis dans l'atmosphère au cours de la combustion. Dans les grandes installations de combustion, le  $NO_x$  est composé de plus de 90 % de  $NO$  [8]. Ce sont des composés indésirables au vu de leur participation à la formation des précurseurs de pluies acides, à la destruction de la couche d'ozone et au réchauffement climatique. La connaissance des réactions chimiques de formation et des techniques de réduction de ces produits nocifs nécessitent une bonne maîtrise des mécanismes réactionnels. Ces mécanismes réactionnels sont au nombre de quatre, définis par l'origine de l'azote et l'environnement où la réaction se produit :

- Le mécanisme thermique
- Le mécanisme précoce
- Le mécanisme de formation à partir de l'azote contenu dans le combustible
- Le mécanisme de formation du protoxyde d'azote (nitrous oxide mechanism)

#### 3.1.1. Le mécanisme thermique

Le  $NO$  thermique se forme dans la zone de réaction, principalement à partir de l'azote de l'air. La température d'activation de la réaction de formation du  $NO$  thermique est de  $1300^\circ C$  [1]. Son apparition est donc favorisée par des températures élevées et un milieu oxydant.

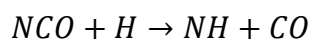
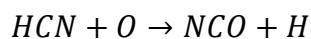
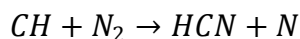
Sa formation est initiée par la réaction de l'azote de l'air avec de l'oxygène :



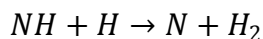
#### 3.1.2. Le mécanisme précoce

Le  $NO$  précoce est le résultat d'une attaque de la molécule d'azote de l'air par des radicaux hydrocarbonés tel que  $CH$  et  $CH_2$  capables de rompre la liaison de l'azote.

Ces réactions conduisent à des produits cyanurés ( $HCN$ ,  $CN$ ) puis à des amines, réagissant pour donner éventuellement du  $NO$ . Ce mécanisme est prépondérant dans les zones riches en combustible.



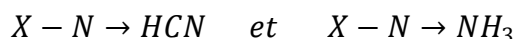
# Chapitre I



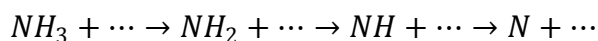
Les atomes d'azote libérés par la dernière de ces réactions réagissent avec de l'oxygène suivant le mécanisme thermique.

### 3.1.3. Le mécanisme impliquant l'azote contenu dans le combustible

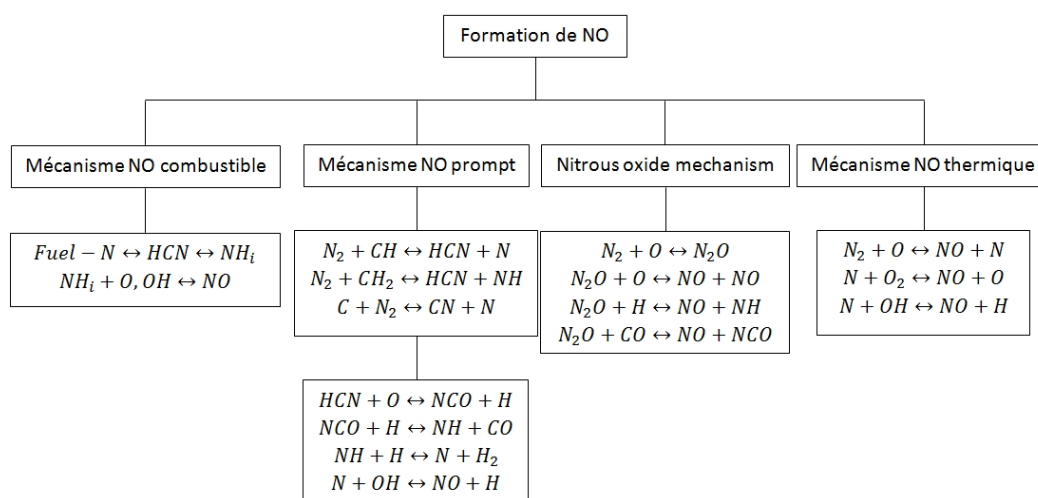
Le mécanisme du  $NO$  combustible résulte de la teneur en azote des combustibles fossiles. Lors de la phase de pyrolyse d'un carburant azoté, l'azote est libéré sous forme de composés cyanurés et d'amines. Les cyanures entrent dans le circuit réactionnel pour produire, finalement, le  $N_2$  ou le  $NO$ , celui-ci pouvant réagir suivant le mécanisme du  $NO$  thermique. Dans le cas du gaz naturel, l'azote moléculaire, ne se distinguant en rien de l'azote de l'air, réagira de la même manière que celui-ci.



Les réactions principales de formation de  $NO$  à partir de  $HCN$  sont les mêmes que celles du mécanisme précoce. La transformation de  $NH_3$  en  $NO$  repose sur des intermédiaires  $NH_i$  formés par une déshydrogénation progressive. Ces radicaux produisent ensuite  $NO$  par réaction avec  $O_2$ ,  $O$  et  $OH$ .



Le schéma ci-après présente les différentes réactions de formation des  $NO_x$  :



**Fig.I.7 : mécanismes de formation des  $NO_x$  [7]**

### 3.2. Formation des oxydes de soufre

Les émissions d'oxydes de soufre résultent principalement du soufre que contient le combustible. Leur nature et leur concentration dépendent du combustible utilisé. Le soufre est présent en grande proportion dans les combustibles liquides (0.1% dans le Kérosène et environs 3% dans les combustibles lourds, en termes de masse) [7]. C'est ce type de combustibles qui cause des ennuis d'un point de vue environnemental.

Dans les combustibles fossiles, il est présent soit sous forme de sulfures inorganiques, soit sous forme de composés organiques. Au cours de la combustion, l'oxyde de soufre produit en majorité est le dioxyde ( $SO_2$ ).

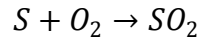
# Chapitre I

---

Le gaz naturel est généralement considéré comme exempt de soufre. Ceci n'est pas le cas de certains gaz industriels qui peuvent nécessiter une désulfuration [8].

## 3.2.1. Dioxyde de soufre

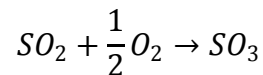
Le  $SO_2$  est formé à partir du soufre avec de l'oxygène selon la réaction suivante :



Le dioxyde de soufre est un produit nuisible pour plusieurs raisons dont la principale est qu'il entre en réaction avec d'autres produits pour former du  $SO_3$ ,  $H_2SO_4$  aérosol et des pluies acides, nuire à la santé et causer la corrosion.

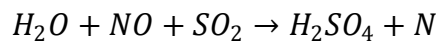
## 3.2.2. Trioxyde de soufre

Lorsqu'on a affaire à des foyers de combustion utilisant des combustibles fossiles, on doit rendre compte du fait que la catalyse hétérogène est une voie possible de la conversion du  $SO_2$  en  $SO_3$ . Aux basses températures, le  $SO_2$  réagit avec l'atome de l'oxygène donnant ainsi le  $SO_3$  selon la réaction suivante :



Aux températures élevées, la réaction s'inverse et c'est la raison pour laquelle la concentration mesurée (réelle) du  $SO_3$  est relativement faible comparativement à celle calculée (théorique) [7].

En réagissant avec le NO en présence d'eau, le  $SO_2$  forme l'acide sulfurique selon la réaction :



## 3.3. Formation du monoxyde de carbone

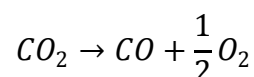
En dehors des produits de combustion habituels des hydrocarbures ( $CO_2$ ,  $H_2O$ ), on trouve le monoxyde de carbone ( $CO$ ). Sa concentration est en général supérieure à celle calculée à partir des conditions d'équilibre, elle dépend de la température et de l'excès d'air (richesse).

Le  $CO$  a deux principaux effets négatifs :

- Dans l'organisme, il réagit avec l'hémoglobine et empêche l'oxygénation du sang.
- Dans l'atmosphère, le  $CO$  participe à l'effet de serre, au même titre que le dioxyde de carbone.

Les exploitants des installations essaient toujours de minimiser la formation du  $CO$ . Pour eux, il n'est pas seulement indésirable pour les raisons ci-dessus, mais il engendre également des risques de corrosion et d'imbrûlés, ce qui entraîne donc une diminution du rendement.

A l'équilibre, le  $CO$  est obtenu suivant la réaction chimique :

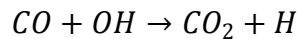




# Chapitre I

---

Le  $CO$  est formé rapidement et en grandes quantités dans la zone primaire, il est ensuite oxydé en  $CO_2$  suivant la réaction :



La quantité du  $CO$  oxydé dépend du temps de séjour qui est lié directement aux dimensions de la flamme. Plus petite sera la flamme, plus importante sera la concentration du  $CO$ . La teneur des gaz brûlés en  $CO$  varie de 0,3 ppm pour les grandes chambres de combustion à environ 20 ppm pour les petites [7].

## 4. La combustion dans les turbines à gaz

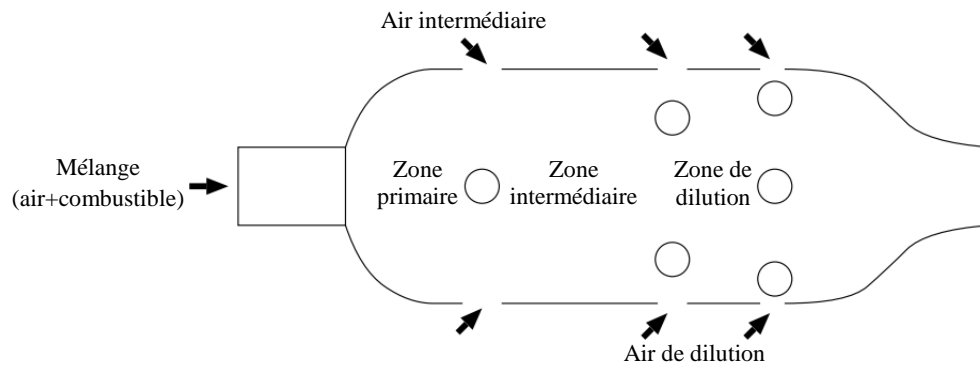
### 4.1. La chambre de combustion

Une chambre de combustion de turbine à gaz doit répondre à certaines conditions pour assurer un fonctionnement optimal :

- Le carburant doit être brûlé en totalité.
- L'allumage doit pouvoir s'effectuer aux basses températures ambiantes.
- La zone de fonctionnement stable doit être importante (large gamme de pression et de rapport de mélange comburant/carburant).
- L'aubage de la turbine doit résister aux sollicitations thermiques qu'engendrent les gaz brûlés.
- Les pertes de charge doivent être aussi faibles que possible.
- Les émissions polluantes doivent répondre aux normes en vigueur.

La chambre de combustion d'une turbine à gaz comporte plusieurs parties (**fig. I.8**). Tout d'abord, un système d'injection de carburant qui a pour rôle de rendre homogène le mélange entre le combustible (liquide ou gazeux) et le comburant. Ensuite, vient la zone primaire qui a pour fonction d'accrocher la flamme. Dans cette zone, le temps de séjour du mélange est assez long et la turbulence est suffisamment importante pour obtenir une combustion complète. Ces objectifs sont d'ailleurs souvent atteints en utilisant différentes techniques d'écoulement dites à Swirl (tourbillonnaires). La température des gaz à la sortie de la zone primaire est particulièrement élevée (environ 2000 K), il en résulte des réactions de dissociation, d'où une concentration significative en monoxyde de carbone et en dihydrogène. Ainsi, une attaque directe par la zone de dilution ferait office de trempe et figerait la réaction chimique [1].

Une zone intermédiaire est placée entre la zone primaire et la zone de dilution afin d'abaisser la température. Enfin, la zone de dilution permet d'homogénéiser la température afin d'éviter l'apparition d'éventuels points chauds sur l'aubage de la turbine.



**Fig.I.8 : Les différentes zones de la chambre de combustion [1]**

## 4.2. Techniques de réduction des émissions d'oxydes d'azote

Le gaz naturel est le carburant le plus fréquemment utilisé dans les centrales à turbine à gaz. Son avantage écologique réside dans le fait qu'il est exempt de soufre. Ce combustible est composé principalement de méthane, ce qui permet d'obtenir des émissions de  $CO_2$  plus faibles que pour les combustibles liquides pour une même production d'énergie, par exemple  $(CO_2(CH_4) = 197 \frac{g}{kWh_{PCI}}, CO_2(C_8H_{18}) = 248gkWh_{PCI}$  [4]. Un autre avantage de ce combustible est sa très faible teneur en azote. Les  $NO_x$  sont alors produits essentiellement par le  $NO$  thermique. La stratégie adoptée pour réduire les  $NO_x$  repose donc principalement sur la réduction de la température et du temps de séjour des gaz dans les zones les plus chaudes de la chambre de combustion.

Intervenant sur la combustion, plusieurs procédés de réduction des émissions de  $NO_x$  ont été développés. On distingue l'étagement de la combustion, la recirculation des produits de combustion, l'oxycombustion, la combustion pauvre, l'oxydation sans flamme, la combustion catalytique et l'injection de vapeur d'eau.

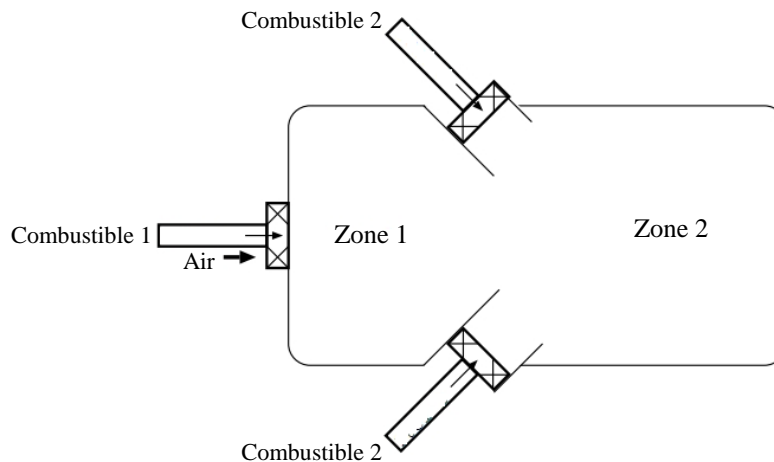
En effet, la réduction des  $NO_x$  repose sur trois grands principes :

- Défaut/excès d'oxygène (on joue sur le paramètre de « richesse »).
- Réduction de la température en diminuant soit la température de la flamme, soit le temps de séjour des gaz dans les zones de températures élevées.
- Utilisation d'un catalyseur ou recirculation des gaz.

### 4.2.1. Défaut/excès d'oxygène

La première méthode de réduction des  $NO_x$  est la combustion stratifiée. Le but est de brûler le mélange combustible/air dans des zones de faibles émissions (riche et pauvre) tout en minimisant la production de  $CO$ . L'étagement de la combustion s'effectue du riche vers le pauvre ou inversement. Du riche vers le pauvre, la zone très riche favorise la recombinaison du  $NO$  en  $N_2$ , puis l'air est envoyé en excès dans la zone dite de dilution pour finir la réaction. Maintenant, du pauvre vers le riche, la première zone réduit le  $NO$  par les températures relativement basses, puis dans la deuxième zone, les radicaux libres détruiront le  $NO$  produit dans la zone primaire.

Ce procédé est difficile à réaliser, car les richesses doivent être bien ajustées pour éviter les imbrûlés. D'une manière générale, la stratification riche-pauvre est plus efficace que la stratification pauvre-riche [2].



**Fig.I.9 : principe de la combustion étagée [1].**

La stratification peut être obtenue en étagant le combustible aussi bien que l'air. On peut aussi distinguer l'étagement externe de l'étagement interne. Pour cette dernière, la stratification est créée par un effet aérodynamique. La stratification externe est due à une séparation physique par l'injection du combustible et/ou d'air en plusieurs emplacements de la chambre créant ainsi des zones de richesses différentes.

En général, les turbines à gaz fonctionnent à débit d'air constant. Une augmentation de la puissance implique une augmentation de la richesse du mélange et donc une forte augmentation de  $NO_x$ . Une technique, appelée à géométrie variable, permet de résoudre le problème. Elle consiste à modifier la répartition de l'écoulement entre l'injecteur et la zone de dilution en fonction du régime de fonctionnement. Aux puissances élevées, le débit est augmenté au niveau de l'injecteur afin de garder une richesse de combustion pauvre. Inversement, à faible puissance, une partie du débit d'air que fournit l'injecteur est dévié vers les gaz chauds de combustion. Une combustion pauvre est donc maintenue quelle que soit la puissance de fonctionnement, permettant le maintien d'un faible niveau d'émission de polluants.

#### **4.2.2. Réduction de la température de la flamme**

Une méthode simple de réduction de la température consiste à procéder par dilution.

Trois techniques sont utilisées :

1. La première consiste à injecter de l'eau dans le combustible. Les problèmes rencontrés sont une grande complexification de l'installation, un risque de corrosion et un coût plus élevé à cause de la consommation d'eau.
2. La deuxième consiste à recycler les gaz brûlés. Comme dans le cas précédent les gaz injectés sont des gaz inertes. Cette technique nommée EGR (Exhaust Gas Recirculation) est couramment employée dans les moteurs automobiles. Avec une turbine à gaz, une diminution de 60% de la production de  $NO_x$  avec

seulement 10% de gaz recerclés [4]. La chute des performances de la turbine qui entraîne une augmentation de la consommation est l'inconvénient majeur de cette technique. Le recyclage des gaz brûlés peut également être obtenu avec des recirculations internes créées par exemple à l'aide d'un écoulement à swirl (à l'aide d'une hélice).

3. La dernière consiste à utiliser un pré-mélange homogène carburant/comburant. Ainsi, il est possible de brûler le mélange en régime pauvre et éviter les pics de température. Cette méthode est difficile à mettre en œuvre à cause des limites d'inflammabilité à très faibles richesses et d'un possible flash-back dans ces conditions.

Toutes ces méthodes ont en commun d'occasionner une augmentation des imbrûlés et du  $CO$ .

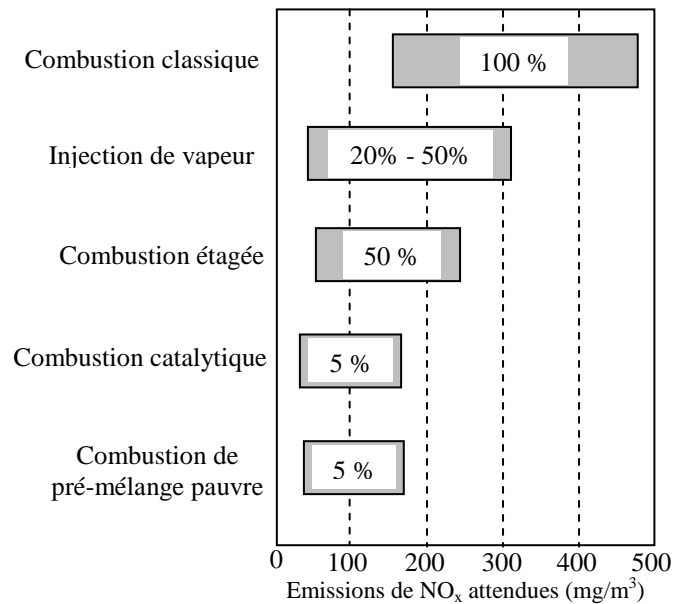
La température de la flamme peut également être réduite en diminuant la température de préchauffage d'air. Ceci ne peut être réalisé du moment que le rendement de la turbine diminue et qu'on se retrouve contradictoires dans nos objectifs. D'une part, on investit pour installer un préchauffeur d'air qui accroît la température d'entrée de la chambre et ainsi améliore les performances de l'installation, et d'autre part, on cherche à minimiser cette température afin de réduire les émissions de  $NO_x$ . Au contraire, l'augmentation de la température d'entrée pour une température de sortie fixe est connue pour diminuer le  $CO$  et même parfois les  $NO_x$  [3]. La richesse nécessaire pour atteindre une température de sortie est plus faible pour une température d'air plus élevée, ce qui réduit les zones de très haute température. Dans les turbines à gaz, la température d'entrée est augmentée par la récupération de la chaleur sur les gaz d'échappement, on parle alors de cycle régénératif. Ce principe est exploité à l'extrême dans le cas de la combustion sans flamme [5]. Il s'agit, dans cette méthode, de récupérer le maximum de chaleur à l'échappement.

### 4.2.3. Autres techniques de réduction des émissions de polluants

L'adjonction d'additifs et la combustion catalytique sont des solutions très efficaces. Mais ces procédés sont pour l'instant onéreux, demandent un entretien important et n'offrent pas une durée de vie suffisamment longue.

L'oxycombustion, dans ce contexte, consiste à utiliser un comburant dont la concentration en oxygène est supérieure à 90% à la différence de l'air qui en contient en moyenne 20,8%.

Les niveaux d'émissions réalisés par les différentes méthodes de réduction décrites ci-dessus sont présentés sur la figure (I.10) ci-après par rapport au niveau d'émissions référentiel des chambres de combustion conventionnelles.



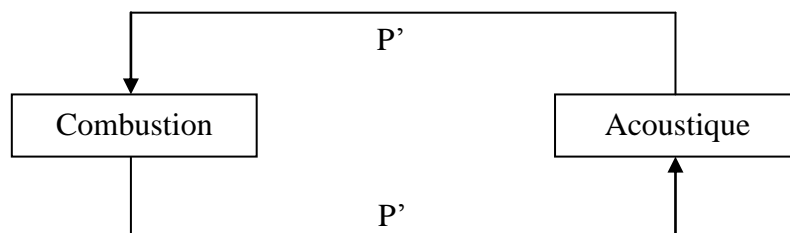
**Fig.I.10 : Performance des différentes méthodes de réduction des NO<sub>x</sub> [3].**

## 5. Instabilité de la flamme

Lors de la combustion en milieu humide, se posent les problèmes d'instabilité et de la baisse de rendement de la combustion, entraînant une croissance de la présence du CO et d'imbrulés dans les produits. Les instabilités de combustion sont nombreuses. Certaines sont intrinsèques au mécanisme de propagation d'un front de flamme, d'autre font intervenir les propriétés de la chambre de combustion et/ou son système d'alimentation. Elles peuvent se manifester de différentes manières, comme par exemple un retour de flamme "flash-back", un lift ou même une extinction de flamme (décrochage). Toutefois, les instabilités les plus importantes sont le résultat d'un couplage intense entre la combustion et les modes de résonance acoustiques. Ces phénomènes récurrents posent de sérieux problèmes de dégradation des performances ou de vieillissement prématuré de certains équipements.

### Mécanisme des instabilités thermoacoustiques

Dans ce type d'instabilités, on a d'une part les fluctuations de pression qui influencent les fluctuations de chaleur et d'autre part, ces dernières génèrent à leur tour des fluctuations de pression d'où la boucle potentiellement instable de la figure ci-dessous.



**Fig.I.11 : Boucle d'instabilité thermoacoustique**

# Chapitre I

---

On assiste donc à :

- ✓ L'action du dégagement de chaleur par les réactions de combustion exothermiques sur l'acoustique : génération d'une augmentation de pression  $P'$  qui vient s'ajouter à la fluctuation de pression acoustique incidente sur la flamme ;
- ✓ L'action de l'acoustique sur le taux de dégagement de chaleur, action qui peut se manifester de différentes façons : -Fluctuations purement cinématiques du front de flamme ; -Fluctuations réduites par des structure tourbillonnaires ; -Fluctuations de richesse ; -Fluctuations d'atomisation et de vapeur de gouttelettes dans le cas d'un combustible liquide.

## Chapitre II

# **Etude de l'influence de l'injection d'eau dans les réactifs sur la température et la composition des produits à l'équilibre thermodynamique**

## Chapitre II

### 1. Introduction

La réaction de combustion s'effectue de façon très complexe, en plusieurs étapes, généralement insuffisamment connues, qui se succèdent très rapidement dès la collision des molécules du combustible avec celle de l'oxygène jusqu'à la formation finale des produits de combustion stables. La combustion théorique reste un cas idéal impossible à réaliser en pratique, son étude est d'intérêt essentiel, car elle sert de base à l'étude de la combustion réelle. Le principe de la combustion théorique consiste à faire brûler tous les composants du combustible conformément aux réactions stœchiométriques.

Dans ce chapitre, la température de la flamme adiabatique et la composition des produits de la combustion du gaz naturel seront déterminées en fonction de la quantité de vapeur d'eau injectée dans l'air. En supposant des conditions de déroulement de la combustion en équilibre thermodynamique. Ce qui signifie que toutes les probabilités de rencontre entre les espèces concernées par toutes les interactions possibles sont égales à l'unité, ou atteint alors un état d'équilibre où les seules interactions qui subsistent sont celles de dissociations dont la vitesse de dissociation est égale à la vitesse de recombinaison. La composition des produits obtenus à partir de conditions de réaction données, ne dépendent alors plus que de la température. Le système d'équilibre à résoudre comporte dans ce cas :

- ✓ Les équations exprimant les constantes d'équilibre des réactions de dissociation en fonction de la température ;
- ✓ Les équations de conservation des éléments impliqués dans la réaction ;
- ✓ L'équilibre de l'énergie dans sa forme intégrale réduite à un bilan d'enthalpie ;

### 2. Combustion du gaz naturel

La composition du gaz naturel utilisé est donnée dans le tableau suivant :

**Tableau II.1** : Composition moyenne du gaz naturel

Constituants	Formule	Composition molaire (%)	Composition massique (%)	Enthalpie de formation $\bar{h}_f^\circ$ (kJ/kmol)
Azote	$N_2$	0.75	1.14	0
Dioxyde de carbone	$CO_2$	2.10	5.02	-393522
Méthane	$CH_4$	85.99	74.73	-74873
Ethane	$C_2H_6$	9.98	16.26	-84667
Propane	$C_3H_8$	1.11	2.65	-103847
Isobutane	<i>i</i> $C_4H_{10}$	0.04	0.12	-208447
n-butane	<i>n</i> $C_4H_{10}$	0.03	0.08	-208447



## Chapitre II

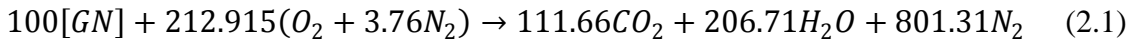
### 2.1. Combustion stœchiométrique

**Tableau II.2 :** Réactions stœchiométriques impliquant les divers constituants du gaz naturel

Constituants	Réactions
$N_2$	$0.75 N_2 \rightarrow 0.75 N_2$
$CO_2$	$2.10 CO_2 \rightarrow 2.10 CO_2$
$CH_4$	$85.99CH_4 + 2 * 85.99(O_2 + 3.76N_2) \rightarrow 85.99CO_2 + 2 * 85.99(H_2O + 3.76N_2)$
$C_2H_6$	$9.98C_2H_6 + 3.5 * 9.98(O_2 + 3.76N_2) \rightarrow 2 * 9.98CO_2 + 9.98(3H_2O + 3.5 * 3.76N_2)$
$C_3H_8$	$1.11C_3H_8 + 5 * 1.11(O_2 + 3.76N_2) \rightarrow 3 * 1.11CO_2 + 1.11(4H_2O + 5 * 3.76N_2)$
$C_4H_{10}$	$0.07C_4H_{10} + 6.5 * 0.07(O_2 + 3.76N_2) \rightarrow 4 * 0.07CO_2 + 0.07(5H_2O + 6.5 * 3.76N_2)$

La réaction globale du gaz naturel pour une combustion stœchiométrique est la somme des différentes réactions impliquant ses divers constituants, elles sont écrites pour 100 moles de combustible dans le tableau (II.2) ci-dessus.

La réaction stœchiométrique globale sera donc pour 100 moles de GN:



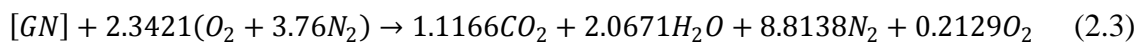
ou encore pour 1 mole :



### 2.2. Réaction de combustion avec excès d'air

On définit le rapport d'air théorique par la quantité d'air réellement utilisée dans une combustion sur la quantité d'air correspondant à la combustion stœchiométrique. Multiplié par 100, ce rapport exprime alors le pourcentage d'air théorique. S'il est inférieur à 100, la quantité qui lui manque pour atteindre la valeur 100 est appelée défaut d'air, ainsi pour un rapport égal à 90, on dira que le défaut d'air est de 10 %. S'il est supérieur à 100, la quantité obtenue en lui retranchant la valeur 100 est appelée excès d'air, ainsi pour un rapport égal à 110, on dira que l'excès d'air est de 10 %.

Dans les turbines à gaz, la combustion se fait généralement avec un excès d'air qui varie entre 10 et 20 %, et ce pour avoir une combustion complète (produire tout le  $CO_2$  possible). Dans les calculs qui suivent, nous utiliserons un excès d'air de 10 %, ce qui se traduit par la multiplication du facteur 2.12915 de l'air dans la réaction (II.2) ci-dessus par 1.1, la réaction globale correspondante sera donc :



Dans les réactions écrites ci-dessus, l'air de combustion est un air standard sec, c'est-à-dire qu'il est considéré dénué de vapeur d'eau. L'objectif de notre étude étant de mettre en évidence l'influence de l'injection de vapeur d'eau dans l'air sur la température et la composition des produits, nous allons à présent ajouter aux réactifs de la réaction (Tableau II.3) la quantité d'eau correspondant à différents teneurs de l'air en humidité.

Le tableau (II.3) ci-dessous donne les réactions de combustion correspondant aux différentes teneurs en eau considérées dans cette étude:

## Chapitre II

**Tableau II.3:** Réactions de combustion du GN pour différentes teneurs de l'air en eau

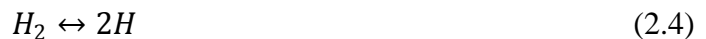
Teneur de l'air en $H_2O$ (%)	Réactions
0	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 0H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 2.0671H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
5	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 0.25H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 2.6541H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
10	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 0.529H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 3.3151H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
15	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 0.847H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 4.0341H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
20	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 1.19H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 4.8541H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
25	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 1.587H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 5.784H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
30	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 2.04H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 6.8451H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
35	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 2.563H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 8.069H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$
40	$[GN] + 2.3421(O_2 + 3.76N_2 + 3.173H_2O)$ $\rightarrow 1.1166CO_2 + 9.499H_2O + 8.8138N_2 + 0.2129O_2$

### 3. Analyse de la combustion avec dissociation

On suppose que le processus de combustion est arrivé à terme et que l'équilibre chimique est établi. Dans ces conditions, la loi de conservation de masse, la loi d'action de masse et la loi de Dalton déterminent complètement le système.

Les réactions de dissociation sont différentes des réactions de combustion en ce sens que les réactifs ne sont pas totalement brûlés. Elles sont caractérisées par un état d'équilibre à tout instant, correspondant à un taux de production égale à celui de dissociation.

Les réactions de dissociation envisagées dans cette étude sont :

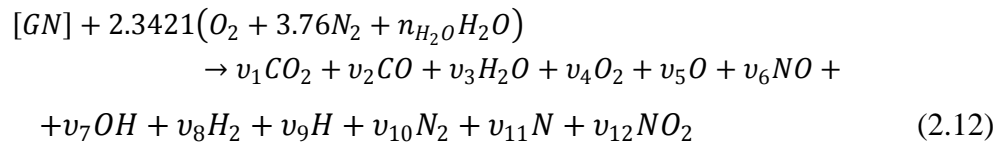


## Chapitre II

---



En tenant compte de ces dissociations, la réaction décrivant le processus de combustion s'écrit dans ce cas:



### 4. Equations régissantes

#### 4.1. Equations d'équilibre chimique

Soit une réaction de dissociation de forme générale :



Une telle réaction est caractérisée par une constante d'équilibre  $K$  dépendante de la température et donnée par l'expression :

$$K(T) = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} \left( \frac{P}{P_0} \right)^{c+d-a-b} \quad (2.1')$$

pour  $P = P_0 = 1 \text{ atm}$  :

$$K(T) = \frac{[C]^c [D]^d}{[A]^a [B]^b} \quad (2.2')$$

où  $[A]$ ,  $[B]$ ,  $[C]$  et  $[D]$  sont les concentrations molaires des espèces correspondantes dans le mélange des produits.

L'équation (II.3') peut se mettre sous la forme suivante :

$$a \ln[A] + b \ln[B] - c \ln[C] - \ln[D] + \ln(K(T)) = 0 \quad (2.3')$$

Les valeurs de la constante d'équilibre  $K$  en fonction de la température  $T$  sont tabulées pour chaque réaction de dissociation. En annexe A, de telles données sont présentées puis corrélées entre 1600 K et 2400 K pour les différentes réactions de dissociation considérées ici. Les corrélations obtenues sont de la forme :

$$\ln(K(T)) = A_1/T + A_2 \quad (2.4')$$

Posons  $v = \frac{1}{x_{13}} = \sum_{i=1}^{12} v_i$  : Nombre de mole total des produits.

La fraction molaire d'un constituant (i) est alors  $x_i = \frac{v_i}{v}$  ; les différentes fractions molaires donneront lieu donc à 12 variables  $x_i$  correspondant aux 12 espèces présentes dans les produits de combustion.

Désignons enfin la température de la flamme par la variable  $x_{14}$ .

Les huit équations obtenues par application de la relation (2.4') aux différentes réactions de dissociation considérées sont données au tableau (II.4) ci-après :

## Chapitre II

**Tableau II.4** : Equations d'équilibre chimique

Réactions	Equations d'équilibre
$CO_2 \leftrightarrow CO + (1/2)O_2$	$\log x_1 - \log x_2 - 0.5 \log x_4 - 33458/x_{14} + 10.08 = 0$
$H_2O \leftrightarrow H_2 + (1/2)O_2$	$\log x_3 - 0.5 \log x_4 - \log x_8 - 30249/x_{14} + 6.98 = 0$
$O_2 \leftrightarrow 2O$	$\log x_4 - 2 \log x_5 - 61378/x_{14} + 16.07 = 0$
$(1/2)N_2 + (1/2)O_2 \leftrightarrow NO$	$0.5 \log x_4 - \log x_6 + 0.5 \log x_{10} - 10918/x_{14} + 1.529 = 0$
$H_2O \leftrightarrow OH + (1/2)H_2$	$\log x_3 - \log x_7 - 0.5 \log x_8 - 34723/x_{14} + 8.63 = 0$
$H_2 \leftrightarrow 2H$	$\log x_8 - 2 \log x_9 - 54526/x_{14} + 14.43 = 0$
$N_2 \leftrightarrow 2N$	$\log x_{10} - 2 \log x_{11} - 115399/x_{14} + 16.06 = 0$
$N_2 + 2O_2 \leftrightarrow 2NO_2$	$2 \log x_4 + \log x_{10} - 2 \log x_{12} - 7948.08/x_{14} - 15.16 = 0$

### 4.2. Equations de conservation des éléments chimiques

**Tableau II.5** : Equations de conservation des éléments chimiques

Elément	Equation de conservation
Carbone	$v_1 + v_2 = 1.1166$
Hydrogène	$2v_3 + v_7 + 2v_8 + v_9 = 4.1342 + 2 * 2.3421 n_{H_2O}$
Oxygène	$2v_1 + v_2 + v_3 + 2v_4 + v_5 + v_6 + v_7 + 2v_{12} = 4.7262 + 2.3421 n_{H_2O}$
Azote	$v_6 + 2v_{10} + v_{11} + v_{12} = 17.6276$

Pour compléter ces équations, on introduit la condition de normalisation :

$$\sum_{i=1}^{12} x_i = 1 \quad (2.5')$$

ce qui permet, en divisant les équations du tableau (II.5) ci-dessus par le nombre de mole total, de réécrire les équations de conservation et l'équation de normalisation comme dans le tableau (II.6) ci-après :

**Tableau II.6** : Equations de conservation des éléments

Eléments	Equations
Carbone	$x_1 + x_2 - 1.1166 x_{13} = 0$
Hydrogène	$2x_3 + x_7 + 2x_8 + x_9 - (4.1342 + 2 * 2.3421 n_{H_2O}) x_{13} = 0$
Oxygène	$2x_1 + x_2 + x_3 + 2x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + 2x_{12} - (4.7262 + 2.3421 n_{H_2O}) x_{13} = 0$
Azote	$x_6 + 2x_{10} + x_{11} + x_{12} - 17.6276 x_{13} = 0$
	$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12} - 1 = 0$

## Chapitre II

### 4.3. Equation du bilan d'énergie

On suppose que le gaz naturel est brûlé à 298 K dans 110% d'air théorique à 500 K et on assimile les produits à des gaz parfaits.

Pour un processus de combustion adiabatique, le bilan d'énergie se traduit par une conservation d'enthalpie et on a :

$$H_R = H_P \quad (2.6')$$

avec :

$$H_R = \sum n_i (\bar{h}_f^\circ + \bar{\Delta h})_i = \bar{h}_{f_{[GN]}}^\circ + \bar{h}_{f_{air}}^\circ + \bar{\Delta h}_{air}^{500K} \quad (2.7')$$

Les valeurs des enthalpies de formations du gaz naturel et celles de l'air, ainsi que les variations d'enthalpie de l'état standard jusqu'à la température 500 K pour l'air sont extraites des tables fournies par la référence [10].

Dans le tableau suivant, on présente les résultats des calculs de l'enthalpie des réactifs pour les différentes teneurs de l'air en vapeur d'eau considérées :

**Tableau II.7** : enthalpie des réactifs en fonction de la teneur de l'air en vapeur d'eau

Fractions molaires de $H_2O$ (%)	Enthalpie du [GN] $H_{[GN]}^{298K}$ (kJ/kmol)	Enthalpie d'air $H_{air}^{500K}$ (kJ/kmol)	Enthalpie des réactifs $H_R$ (kJ/kmol)
<b>0</b>	-82338	66308	-16030
<b>5</b>	-82338	-71524	-153862
<b>10</b>	-82338	-224670	-307008
<b>15</b>	-82338	-395834	-478172
<b>20</b>	-82338	-588393	-670731
<b>25</b>	-82338	-806810	-889148
<b>30</b>	-82338	-1056036	-1138374
<b>35</b>	-82338	-1343774	-1426112
<b>40</b>	-82338	-1679377	-1761715

L'enthalpie des produits s'exprime par :

$$H_P = \sum_i^{12} v_i (\bar{h}_{f_i}^\circ + \bar{\Delta h}_i) \quad (2.8')$$

où les  $\bar{\Delta h}_i$  sont fonction de la température des produits.

Une bonne approximation de  $\bar{\Delta h}_i$  consiste à considérer la chaleur spécifique comme une fonction linéaire de la température dans un domaine déterminé. Dans ces conditions les enthalpies seront des fonctions paraboliques de la température.

Les tables thermodynamiques donnent les variations d'enthalpies  $\bar{\Delta h}_i$  par intervalle de 100 K entre 0 et 6000 K [10]. En Annexe B, on a présenté les valeurs de  $\bar{\Delta h}_i$  pour les différentes espèces considérées dans le domaine des températures de 1600 K à 2400 K, ensuite ces valeurs ont été corrélées pour exprimer les  $\bar{\Delta h}_i$  comme des polynômes de 2<sup>ème</sup> degré de la température.

## Chapitre II

$$\overline{\Delta h}_i(T) = \alpha_i T^2 + \beta_i T + \gamma_i \quad (2.9')$$

Sur la base de ces corrélations établies en Annexe (B), les enthalpies des différents constituants présents dans les produits se présentent comme dans le tableau ci-après :

**Tableau II.8** : Corrélations d'enthalpie

Espèce	$\overline{h}_f^\circ$ (kJ/kmol)	$\overline{\Delta h}_i$ (kJ/kmol)	$\overline{h}_f^\circ + \overline{\Delta h}_i$ (kJ/kmol)
<b>CO<sub>2</sub></b>	-393522	$1.453 \cdot 10^{-3} T^2 + 54,48 T - 23329$	$1.453 \cdot 10^{-3} T^2 + 54,48 T - 416851$
<b>CO</b>	-110527	$0.717 \cdot 10^{-3} T^2 + 33,33 T - 12773$	$0.717 \cdot 10^{-3} T^2 + 33,33 T - 123300$
<b>H<sub>2</sub>O</b>	-241826	$3.447 \cdot 10^{-3} T^2 + 37,21 T - 15454$	$3.447 \cdot 10^{-3} T^2 + 37,21 T - 257280$
<b>O<sub>2</sub></b>	0	$1.130 \cdot 10^{-3} T^2 + 33,24 T - 11808$	$1.130 \cdot 10^{-3} T^2 + 33,24 T - 11808$
<b>O</b>	249170	$-0.004 \cdot 10^{-3} T^2 + 20,84 T - 5960$	$-0.004 \cdot 10^{-3} T^2 + 20,84 T + 243210$
<b>NO</b>	90291	$0.648 \cdot 10^{-3} T^2 + 34,03 T - 12789$	$0.648 \cdot 10^{-3} T^2 + 34,03 T + 77502$
<b>OH</b>	38987	$1.458 \cdot 10^{-3} T^2 + 28,79 T - 9657$	$1.458 \cdot 10^{-3} T^2 + 28,79 T + 29330$
<b>H<sub>2</sub></b>	0	$1.774 \cdot 10^{-3} T^2 + 27,14 T - 8436$	$1.774 \cdot 10^{-3} T^2 + 27,14 T - 8436$
<b>H</b>	217999	$-0.006 \cdot 10^{-3} T^2 + 20,81 T - 6219$	$-0.006 \cdot 10^{-3} T^2 + 20,81 T + 211780$
<b>N<sub>2</sub></b>	0	$0.841 \cdot 10^{-3} T^2 + 32,57 T - 12376$	$0.841 \cdot 10^{-3} T^2 + 32,57 T - 12376$
<b>N</b>	472680	$0.014 \cdot 10^{-3} T^2 + 20,74 T - 6155$	$0.014 \cdot 10^{-3} T^2 + 20,74 T + 466525$
<b>NO<sub>2</sub></b>	33100	$0.199 \cdot 10^{-3} T^2 + 55,66 T - 24776$	$0.199 \cdot 10^{-3} T^2 + 55,66 T + 8324$

L'enthalpie des produits s'exprime donc en fonction de la composition de ces derniers et de la température comme suit :

$$\begin{aligned}
 H_P = & (1.453 \cdot 10^{-3} x_1 + 0.717 \cdot 10^{-3} x_2 + 3.447 \cdot 10^{-3} x_3 + 1.130 \cdot 10^{-3} x_4 - 0.004 \cdot 10^{-3} x_5 + \\
 & 0.648 \cdot 10^{-3} x_6 + 1.458 \cdot 10^{-3} x_7 + 1.774 \cdot 10^{-3} x_8 - 0.006 \cdot 10^{-3} x_9 + 0.841 \cdot 10^{-3} x_{10} + \\
 & 0.014 \cdot 10^{-3} x_{11} + 0.199 \cdot 10^{-3} x_{12}) x_{14}^2 + (54,48 x_1 + 33,33 x_2 + 37,21 x_3 + 33,24 x_4 + 20,84 x_5 + \\
 & 34,03 x_6 + 28,79 x_7 + 27,14 x_8 + 20,81 x_9 + 32,57 x_{10} + 20,74 x_{11} + 55,66 x_{12}) x_{14} - \\
 & 416851 x_1 - 123300 x_2 - 257280 x_3 - 11808 x_4 + 243210 x_5 + 77502 x_6 + 29330 x_7 - \\
 & 8436 x_8 + 211780 x_9 - 12376 x_{10} + 466525 x_{11} + 8324 x_{12} \quad (2.10')
 \end{aligned}$$

Avec le bilan d'énergie ainsi obtenu, les huit équations d'équilibre chimique (Tableau II.5) et les cinq équations de conservation (Tableau II.6), nous obtenons un système non-linéaire de 14 équations à 14 inconnues.

La résolution de ce système est obtenue à l'aide du logiciel *MATLAB*. Les détails concernant la méthode de résolution et l'organigramme décrivant la procédure de calcul sont donnés à l'Annexe (C).

Les résultats obtenus sont présentés et interprétés au chapitre (V).

Dans ce chapitre, nous avons étudié la combustion théorique à l'équilibre thermodynamique du gaz naturel [GN] avec 10% d'excès d'air en fonction de la teneur

## Chapitre II

---

en eau de l'air. Vu la complexité de la combustion, cette analyse donne forcément des résultats qui manquent de précision.

Au chapitre suivant, nous allons décrire les différentes équations régissant la combustion réelle et comprenant les équations de transport, de conservation, de l'énergie, de la cinétique et de la turbulence.

## Chapitre III

# **Modélisation des phénomènes présents au cours de la combustion**



## 1. Introduction

Actuellement, la simulation numérique devient ordinaire ; elle sert comme outil de limitation des coûts de conception et de respect des normes en vigueur.

Les applications techniques basées sur la combustion font intervenir la simulation numérique pour prédire les champs dynamiques de l'écoulement, les quantités de chaleur dégagées et la composition des gaz produits. Ces informations sont essentielles pour l'optimisation de ces applications.

La simulation numérique de la combustion, nécessairement turbulente, n'est possible qu'au prix de modélisations basées sur des hypothèses simplificatrices. La modélisation s'opère à deux niveaux interdépendants : modélisation de la combustion (considérée comme laminaire) et modélisation de la turbulence. Ceci nous permettra de décrire l'interaction entre ces deux phénomènes complexes.

## 2. Formulation mathématique des équations de la combustion

Afin de décrire la combustion d'un mélange de  $N$  espèces et de  $E$  éléments, on doit résoudre un système qui comporte autant d'équations que d'inconnues. Ce système doit inclure l'équation de continuité, l'équation de l'énergie, l'équation de la conservation de la quantité de mouvement, l'équation de la conservation des espèces et l'équation d'état. Ces équations sous l'hypothèse de gaz parfaits et de forces volumiques négligeables s'établissent comme suit :

### 2.1. Equation de continuité

L'équation de conservation de la masse totale pour un écoulement réactif est similaire à celle d'un écoulement inerte car la combustion n'apporte aucune modification à la masse.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.1)$$

où  $\rho$  est la masse volumique du mélange et  $\mathbf{u}$  la vitesse moyenne de l'écoulement du mélange, définie par :

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^N Y_i \mathbf{u}_i \quad (2.2)$$

$\mathbf{u}_i$  étant la vitesse de l'espèce  $i$  et  $Y_i$  sa fraction massique.

### 2.2. Equation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \Sigma \quad (2.3)$$

où  $\Sigma$  est le tenseur des contraintes défini par :

$$\Sigma = \left[ P + \left( \frac{2}{3} \mu - \mathcal{K} \right) (\nabla \mathbf{u}) \right] I - \mu [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (2.4)$$

où  $P$  est la pression ;  $\mu$ , le coefficient de viscosité relatif aux contrainte de cisaillement au sein du fluide (viscosité dynamique) ;  $\mathcal{K}$ , coefficient de viscosité apparente qui tient compte des effets de la compressibilité et  $I$ , le tenseur identité.

### 2.3. Equation de conservation des espèces

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}_i Y_i) = \omega_i \quad \text{avec } i = 1, \dots, N \quad (2.5)$$

où  $N$  représente le nombre d'espèces dans le mélange,  $\omega_i$  le taux de production de l'espèce  $i$ ,  $\mathbf{V}_i$  la vitesse de diffusion définie par :

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{u} + \mathbf{V}_i \quad (2.6)$$

En d'autres termes,  $\mathbf{V}_i$  est la vitesse de l'espèce  $i$  relativement au mélange.

Cette vitesse relative est difficile à estimer puisqu'elle se compose de plusieurs termes, à savoir la diffusion thermique, la diffusion sous l'effet de la pression et la diffusion due aux forces extérieures agissant différemment sur chaque espèce du mélange. Son expression globale est obtenue à partir de la théorie cinétique des gaz. En négligeant les forces extérieures, elle sera obtenue à partir de l'équation [11] :

$$\nabla X_i = \sum_{j=1}^N \left( \frac{X_i X_j}{D_{ij}} \right) (\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_i) + (Y_i - X_i) \frac{\nabla p}{p} + \sum_{j=1}^N \left( \frac{X_i X_j}{\rho D_{ij}} \left( \frac{D_j^T}{Y_j} - \frac{D_i^T}{Y_i} \right) \right) \frac{\nabla T}{T} \quad (2.7)$$

où  $X_i$  représente la fraction molaire de l'espèce  $i$ ;  $D_{ij}$ , le coefficient de diffusion de l'espèce  $i$  par rapport à l'espèce  $j$ ;  $T$ , la température et  $D_i^T$ , le coefficient de diffusion thermique de l'espèce  $i$ .

La vitesse de diffusion obéit à la loi :

$$\sum_{i=1}^N Y_i \mathbf{V}_i = 0 \quad (2.8)$$

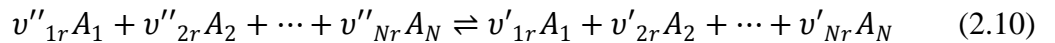
Cependant, c'est la loi de Fick qui est souvent utilisée :

$$Y_i \mathbf{V}_i = -D_{ij} \nabla Y_i \quad (2.9)$$

Elle est valable pour un mélange binaire où [11] :

- La diffusion thermique est négligée
- Les forces volumiques agissant sur les espèces  $i, j$  sont considérées identiques.
- Les masses molaires des espèces sont égales ou la pression est constante.

Le terme source  $\omega_i$  est défini de façon plus détaillée en considérant le mécanisme réactionnel, qui comporte un grand nombre de réactions élémentaires dont le taux de réaction est fonction de la température, de la pression et des espèces impliquées. En général, Chaque réaction élémentaire est décrite comme suit :



où l'indice  $r$  se rapporte à la  $r^{\text{ème}}$  réaction;  $A_j$ , est une espèce; et  $v''_{jr}$  et  $v'_{jr}$ , les coefficients stœchiométriques de cette espèce respectivement avant et après la  $r^{\text{ème}}$  réaction. Pour une seule espèce  $i$ , le taux de production  $\omega_i$  est la somme des taux de production de cette espèce dans toutes les réactions élémentaires où elle est impliquée, il est donné par l'expression :

$$\omega_i = M_i \sum_{r=1}^R (v''_{ir} - v'_{ir}) \left( k_r^f \prod_{n=1}^N [A_n]^{v'_{nr}} - \frac{k_r^r}{K_r} \prod_{n=1}^N [A_n]^{v''_{nr}} \right) \quad (2.11)$$

## Chapitre III

où  $R$  est le nombre de réactions ;  $[A_n]$ , la concentration molaire de l'espèce  $n$  ;  $k_r^f$ , le taux direct de la réaction  $r$  et  $K_r$ , la constante d'équilibre de cette même réaction.

La détermination des taux direct  $k_r^f$  et inverse  $k_r^b$  d'une réaction constitue un problème central dans la modélisation de la combustion. Ils sont toujours modélisés en utilisant la loi empirique d'Arrhenius [11]:

$$k_r^f = A_r^f T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{E_r}{RT}\right) = A_f T^{\beta_r} \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \quad (2.12)$$

La connaissance du taux de réaction direct  $k_r^f$  de chaque réaction nécessite la connaissance de la constante  $A_r^f$ , l'exposant de la température  $\beta_r$  et la température d'activation  $T_a$  (où l'énergie d'activation  $E_r = RT_a$ ). Afin d'évaluer ces constantes, on doit identifier les espèces et les réactions à inclure dans le mécanisme réactionnel.

Le tableau suivant présente les énergies d'activation, les constantes  $A_r^f$  et l'exposant  $\beta_r$  de certaines réactions mises en jeu lors de la combustion du méthane avec de l'air :

**Tableau III.1 :** Energies d'activation, les constantes  $A_r^f$  et l'exposant  $\beta_r$  de quelques réactions

Réaction	Energie d'activation (J/kg mol)	$A_r^f$	$\beta_r$
$CH_4 + H \leftrightarrow CH_3 + H_2$	8750	$2.2 \cdot 10^4$	3
$CH_4 + O_2 \leftrightarrow CH_3 + HO_2$	56000	$7.9 \cdot 10^{13}$	0
$CH_2 + OH \leftrightarrow CH + H_2O$	3000	$4.5 \cdot 10^{13}$	0
$H_2 + O_2 \leftrightarrow 2OH$	47780	$1.7 \cdot 10^{13}$	0
$OH + H_2 \leftrightarrow H_2O + H$	3626	$1.17 \cdot 10^9$	1.3
$O + H_2 \leftrightarrow OH + H$	8826	$1.8 \cdot 10^{10}$	1
$CO + O_2 \leftrightarrow CO_2 + O$	41000	$1.6 \cdot 10^{13}$	0
$CO + OH \leftrightarrow CO_2 + H$	-758	$1.51 \cdot 10^7$	1.3
$HCO + M \leftrightarrow H + CO + M$	14700	$1.6 \cdot 10^{14}$	0
$HO_2 + CO = CO_2 + OH$	22934	$5.8 \cdot 10^{13}$	0
$CH + CO_2 \leftrightarrow HCO + CO$	690	$3.4 \cdot 10^{12}$	0
$CH_2 + CO_2 \leftrightarrow CH_2O + CO$	1000	$1.1 \cdot 10^{11}$	0

Le taux de production est parfois amélioré par la pression et les chocs tri-moléculaires efficaces.

### 2.4. Conservation de l'énergie

$$\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla e = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \Sigma : \nabla \mathbf{u} \quad (2.13)$$

où  $e$  est l'énergie interne et  $\mathbf{q}$  le flux de chaleur.

Le flux de chaleur est donné par la relation :

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{i=1}^N h_i Y_i \mathbf{V}_i + RT \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( \frac{X_j D_j^T}{M_j D_{ij}} \right) (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) + \mathbf{q}^{rad} \quad (2.14)$$

## Chapitre III

avec  $\lambda$ , conductivité thermique ;  $h_i$ , enthalpie spécifique de l'espèce  $i$  ;  $R$ , constante des gaz parfaits ;  $M_i$ , masse molaire de l'espèce  $i$  et  $q^{rad}$ , flux de chaleur par rayonnement.

La loi des gaz parfaits nous permet d'écrire :

$$p = \frac{\rho R_g T}{\bar{M}} \quad (2.15)$$

où  $\bar{M}$  est la masse molaire moyenne du mélange, définie par :

$$\bar{M} = \sum_{i=1}^N X_i M_i = \frac{1}{\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{M_i}} \quad (2.16)$$

En outre, l'énergie interne  $e$  est liée à l'enthalpie  $h$  par :

$$e = h + \frac{p}{\rho} \quad (2.17)$$

avec :

$$h = \sum_{i=1}^N h_i Y_i \quad (2.18)$$

et l'enthalpie spécifique :

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_0}^T C_{p,i}(T) dT \quad (2.19)$$

où  $C_{p,i}$ , est la chaleur spécifique à pression constante de l'espèce  $i$  et  $h_i^0$ , son enthalpie de formation à la température standard ( $T_0 = 298 \text{ K}$ ).

Toutes les équations écrites ci-dessus à savoir : l'équation de continuité, l'équation de la quantité de mouvement, l'équation d'énergie et l'équation de la conservation des espèces sont applicables dans le cas d'un écoulement réactif laminaire.

### 3. Hypothèses générales

Les hypothèses suivantes sont faites pour simplifier les équations décrites ci-dessus [11] :

- ✓ Le nombre de Lewis  $Le$  est supposé égal à l'unité pour toutes les espèces

$$Le = \frac{\lambda}{\rho D_{ij} C_p} \equiv 1 \quad (2.20)$$

- ✓ La diffusion thermique est négligée
- ✓ La diffusion sous l'effet de la pression est négligée
- ✓ La viscosité apparente  $\mathcal{K}$  est négligée
- ✓ Les différentes espèces seront considérées comme des traceurs diffusant au sein d'une seule espèce dominante
- ✓ La masse molaire moyenne du mélange est supposée constante
- ✓ Le nombre de Mach de l'écoulement est supposé faible
- ✓ Les variations de la pression avec le temps sont négligeables

Ces hypothèses permettent de simplifier les équations de transport précédentes qui deviennent :

- Continuité :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (2.21)$$

➤ Equation de mouvement :

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla (\rho \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) - \nabla p = 0 \quad (2.22)$$

➤ Conservation des espèces :

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{ij} \nabla Y_i) + \omega_i \quad (2.23)$$

➤ Conservation de l'enthalpie :

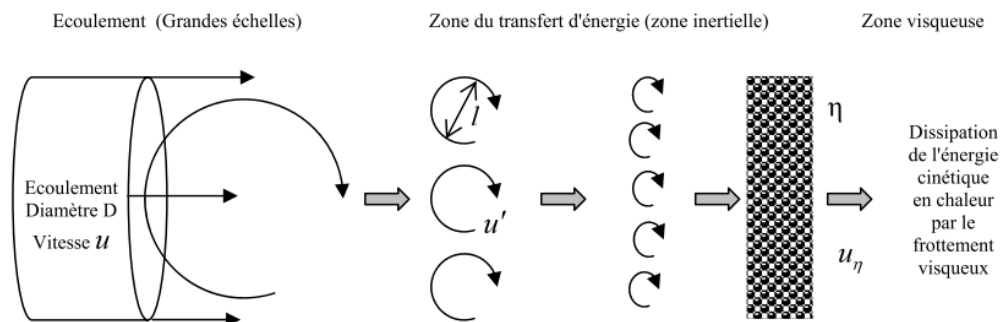
$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} h) - \nabla \cdot (\rho D_{ij} \nabla h) = q^{rad} \quad (2.24)$$

Dans ce qui suit, on va introduire la turbulence.

## 4. Formulation des équations de la turbulence

### 4.1. Introduction à la turbulence

La turbulence est une caractéristique de l'écoulement, elle apparaît lorsque les forces d'inertie sont plus importantes que celles de viscosité (i.e. : cela se produit à des nombres de Reynolds élevés). Ces écoulements sont irréguliers et fortement instationnaires. Les écoulements turbulents sont caractérisés par l'existence d'une multitude de tourbillons de tailles différentes. Les grands tourbillons se divisent en petits tourbillons qui se divisent à leurs tours en plus petits tourbillons. Ce processus continue jusqu'à la prépondérance des forces visqueuses qui dissipent les plus petits tourbillons. Cette cascade de tourbillons est introduite par la théorie de Kolmogorov pour la turbulence homogène et isotrope.



**Fig. III.1 : Cascade d'énergie de Kolmogorov [13]**

La théorie de Kolmogorov suppose que le transfert stationnaire d'énergie des plus grands tourbillons aux plus petits se fait dans la zone dite inertielle. Ce transfert d'énergie est local dans le sens où l'énergie d'un tourbillon est seulement transférée au tourbillon de plus petite taille. Cela implique que le taux de transfert d'énergie, i.e. l'énergie cinétique divisée par le temps de retournement du tourbillon, est indépendant de l'échelle de longueur des tourbillons. Il est constant dans la zone inertielle. Cette invariance est l'hypothèse la plus importante pour les régimes à grands nombres de Reynolds, elle est intégrée dans tous les modèles de turbulence standards.

Il existe deux échelles limitant la zone inertielle largement utilisées, l'échelle de Kolmogorov  $\eta$  et intégrale  $l$ .

## Chapitre III

L'échelle de Kolmogorov spécifie les tourbillons les plus petits où les forces de viscosité dominent ; l'énergie cinétique des plus petits tourbillons est convertie en énergie thermique. Donc, cette échelle est fonction de la viscosité cinématique et du taux de dissipation de l'énergie cinétique. Elle est déterminée par l'analyse dimensionnelle :

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \quad (2.25)$$

où  $\nu$  représente la viscosité cinématique et  $\varepsilon$ , le taux de dissipation de l'énergie.

Ainsi, l'échelle de temps de Kolmogorov est proportionnelle au temps de retournement d'un tourbillon, elle est calculée par l'analyse dimensionnelle :

$$\tau_\eta = \sqrt{\nu/\varepsilon} \quad (2.26)$$

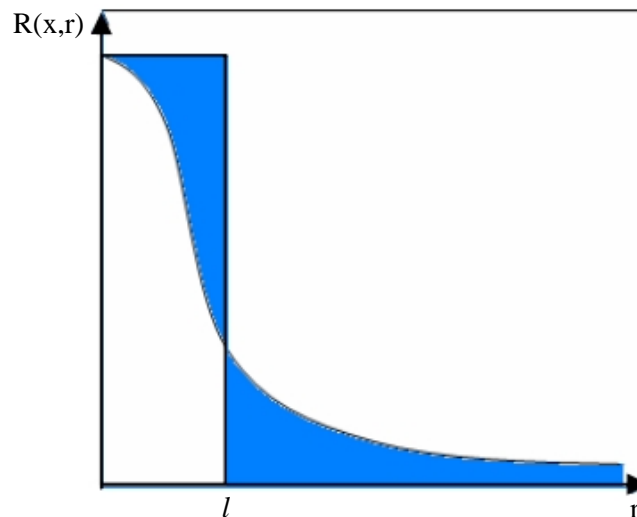
En combinant ces deux relations, la vitesse de retournement d'un tourbillon de Kolmogorov est définie par :

$$u_\eta = (\nu\varepsilon)^{1/4} \quad (2.27)$$

L'échelle intégrale  $l$  correspond à l'échelle de longueur des tourbillons qui emmagasinent le plus d'énergie. Elle est définie à l'aide de la fonction de corrélation normalisée en deux points de la vitesse par :

$$R(x, r) = \frac{\overline{u'(x,t)u'(x+r,t)}}{\sqrt{\overline{u'^2(x,t)}}\sqrt{\overline{u'^2(x+r,t)}}} \quad (2.28)$$

La quantité  $R(x, r)$  donne la corrélation des fluctuations de la vitesse  $u'$  mesurée dans deux points  $x$  et  $x + r$ . La fonction de corrélation est égale à l'unité à la limite  $r \rightarrow 0$  et diminue asymptotiquement vers zéro pour les grandes valeurs de  $r$ .



**Fig. III.2 : Fonction de corrélation de la vitesse [13].**

L'échelle intégrale  $l$  est définie par la relation :

$$l = \int_0^\infty R(x, r) dr \quad (2.29)$$

Dans la figure (III.2), l'intégrale  $l$  est définie lorsque les zones hachurées au-dessus et au-dessous de la courbe de la fonction de corrélation sont des surfaces égales. L'échelle

intégrale  $l$  est la distance à partir de laquelle les fluctuations de vitesses ne sont pas corrélées.

L'échelle intégrale du temps est proportionnelle au temps de retournement d'un tourbillon intégral  $l/u'$ , elle est définie par :

$$\tau = \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.30)$$

où  $k$  est l'énergie cinétique de la turbulence et  $\varepsilon$  est le taux de dissipation de l'énergie cinétique. Ils sont donnés par :

$$k = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{u}'\mathbf{u}'} \quad (2.31)$$

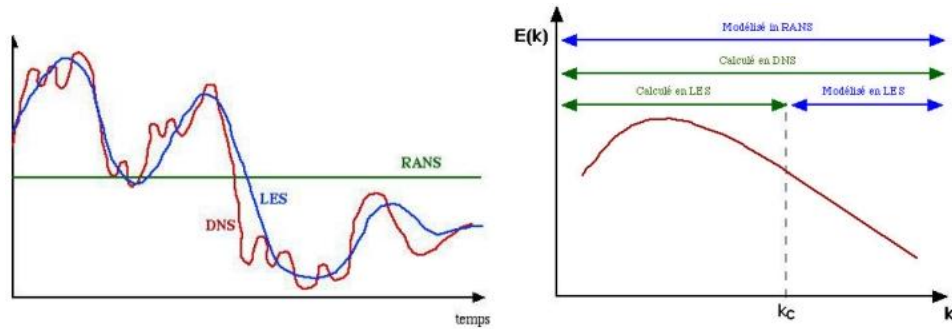
et

$$\varepsilon = \varepsilon'' \approx O\left(\frac{u'^3}{l}\right) \quad (2.32)$$

### 4.2. Modèles de turbulence

Il existe trois approches principales de la simulation numérique des écoulements turbulents (**Fig. III.3**) qui sont :

- ✓ La simulation numérique directe (Direct Numerical simulation/DNS), qui consiste à calculer explicitement toutes les structures de l'écoulement sans aucune autre modélisation que le choix d'un schéma cinétique et la description du transport moléculaire. Cette approche est numériquement extrêmement coûteuse et limitée à de faibles nombres de Reynolds (qui contrôlent la gamme des tailles de structures présentes dans l'écoulement). Cette approche est donc restreinte à des situations académiques simples, malgré la puissance des machines disponibles aujourd'hui. En revanche, elle constitue un outil irremplaçable pour étudier précisément certains phénomènes fondamentaux et aider au développement de modèles.
- ✓ La résolution des équations moyennées (Reynolds averaged Navier Stokes equations/RaNS) se contente de décrire le comportement moyen de l'écoulement mais nécessite la modélisation de tous les effets instationnaires.
- ✓ La simulation aux grandes échelles (Large Eddy Simulation/ LES) apparaît comme intermédiaire entre RaNS et DNS. Il s'agit de calculer les grandes structures turbulentes présentes dans l'écoulement (comme en DNS), tandis que, seul l'effet des plus petites structures est modélisé (comme en RaNS). Elle est plus coûteuse que le RaNS (il faut calculer un écoulement instationnaire, tridimensionnel, en renonçant aux simplifications usuelles du RaNS telles que symétrie, bi-dimensionnalité,...), cette approche est beaucoup moins limitée que la simulation directe (seuls les structures calculées ont besoin d'être résolues).



**Fig. III.3: Les différentes approches utilisées pour la simulation de la combustion turbulente [12].**

Les avantages et inconvénients des différentes approches sont résumés dans le tableau suivant :

Approche	Avantages	Inconvénients
<b>RANS</b>	-Faible, résolution requise -Simplification (2D-symétrie) -Faible coût numérique	-Ecoulement moyen -Modélisation
<b>LES</b>	-Instationnaire -Impact de la modélisation	-Modélisation -Calculs tridimensionnels -Précision numérique -Coût numérique
<b>DNS</b>	-Pas de modèle -Outil d'étude	-Coûts numériques élevés -Problèmes académiques

**Tableau III.2 : Avantages et inconvénient des différentes approches**

## 5. Modélisation de la turbulence

### 5.1. Equations de Navier-Stokes moyennées

La turbulence est un phénomène aléatoire, donc sa description doit être forcément statistique. D'un point de vue technique, seules la moyenne et la variance d'une quantité présentent un intérêt. Toute quantité fluctuante est définie comme étant la somme de la valeur moyenne et d'une fluctuation, soit l'exemple :

$$U = \bar{U} + U' \tag{3.32}$$

où la barre montre que la quantité est moyennée, la prime indique la fluctuation. Les quantités moyennes sont calculées par une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations  $U_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, n$  de cette quantité à un point fixe de l'espace et du temps.

$$\bar{U}(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n U_k(x, t) \tag{3.33}$$

Pour un processus stationnaire, la moyenne du temps ou d'une coordonnée spatiale peut être remplacée par une moyenne statistique. Et puisqu'en régime permanent, le fonctionnement d'une chambre de combustion pourra être considéré comme étant stationnaire, la moyenne du scalaire  $U$  pourra à son tour être écrite par :

$$\bar{U} = \int_{-\infty}^{+\infty} UF(U)dU \tag{3.34}$$



où  $F$  est la fonction de densité de probabilité.

L'intégrale de cette fonction représente la probabilité que la valeur de la variable soit comprise entre les bornes d'intégration de sa fonction de densité :

$$F(U_0 < U < U_1) = \int_{U_0}^{U_1} F(U') dU' \quad (3.35)$$

Lorsque l'intervalle d'intégration est  $] -\infty, +\infty[$ , l'intégrale vaut l'unité.

Quant à la variance  $\sigma$ , elle est définie par :

$$\overline{U'^2} = \sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} U'^2 F(U) dU = \int_{-\infty}^{+\infty} (U - \bar{U})^2 F(U) dU = \overline{U^2} - \bar{U}^2 \quad (3.36)$$

par conséquent, le moment d'ordre  $n$  est défini par :

$$\overline{U'^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} (U - \bar{U})^n F(U) dU \quad (3.37)$$

Cependant, dans les écoulements avec gradient important de densité (cas de la combustion), une moyenne pondérée par la masse, dite moyenne de Favre est souvent utilisée [11,13] :

$$U = \tilde{U} + U'' \quad (3.38)$$

avec  $\tilde{U}$  est la moyenne de Favre, elle est définie par la relation :

$$\tilde{U} = \frac{\overline{\rho U}}{\bar{\rho}} \quad (3.39)$$

ici, le tilde montre la moyenne de Favre qui est utilisée pour simplifier l'écriture des équations dans le cas des écoulements à densité variable. La double prime montre la fluctuation de Favre de la quantité  $U$ . L'application de cette moyenne aux équations de Navier-Stokes réactives donne :

### 5.2. Equation de continuité

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0 \quad (3.40)$$

### 5.3. Equation de conservation des espèces

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i \tilde{Y}_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{V_{k,i} Y_k} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i \tilde{Y}_k'') = \tilde{\omega}_k \quad k = 1, N \quad (3.41)$$

### 5.4. Equation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i \tilde{\mathbf{u}}_j) + \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\tau_{ij}} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i \tilde{\mathbf{u}}_j'') \quad (3.42)$$

### 5.5. Equation d'enthalpie

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i \tilde{h}_s) = \tilde{\omega}_T + \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}} - \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}_i \tilde{h}_s'' \right) + \overline{\tau_{ij} \frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_{s,k}}) \quad (3.43)$$

avec  $\frac{D\bar{P}}{Dt} = \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \mathbf{u}_i \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}}_i \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \mathbf{u}_i'' \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i}$

### 5.6. L'équation d'état du gaz parfait moyennée

$$\bar{P} = \bar{\rho} \bar{r} \bar{T} \quad (3.44)$$

La prise de la moyenne des équations de Navier-stokes génère trois types de termes non fermés. Le premier qui apparaît dans l'équation de la quantité de mouvement  $\bar{\rho} \overline{u_i u_j}$  est dit tenseur de contraintes de Reynolds. Le deuxième et le troisième, sont les termes de transport turbulent d'énergie  $\bar{\rho} \overline{u_i h_s}$  et d'espèces  $\bar{\rho} \overline{u_i Y_i}$ , ils résultent respectivement des équations d'énergie et des fractions massiques moyennées. Ces deux types de termes ouverts sont traités par un modèle de turbulence approprié. Le quatrième terme non fermé est le taux moyen de production chimique  $\bar{\omega}_k$  issu de l'équation des fractions massiques moyennées. La fermeture de ce terme est essentielle dans un modèle de combustion.

### 5.7. Contraintes de Reynolds $\bar{\rho} \overline{u_i u_j}$

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

### 5.8. Flux turbulents d'espèces $\bar{\rho} \overline{u_i Y_k}$ et d'enthalpie $\bar{\rho} \overline{u_i h_s}$

Généralement, ces flux sont modélisés par une fermeture classique en gradient

$$\bar{\rho} \overline{u_i Y_k} = - \frac{\mu_t}{Sc_{kt}} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_i} \quad (3.45)$$

où  $\mu_t$  est la viscosité turbulente calculée du modèle de turbulence ;  $Sc_{kt}$  est un nombre de Schmidt turbulent pour l'espèce  $k$ . Plusieurs travaux ont montré que cette fermeture n'est pas correcte dans quelques flammes turbulentes pré-mélangées où le transport en contre gradient existe (direction opposée à celle supposée par l'expression (3.45)).

## 6. Modèle de turbulence k – ε

L'objectif de ce modèle est de donner une fermeture, à une échelle intégrale  $l$ , pour le tenseur de Reynolds et pour les termes de transport turbulent dans les équations de Navier-Stokes moyennées. Ce modèle utilise le principe de la viscosité turbulente  $\mu_t$  qui est une propriété du champ de l'écoulement turbulent et non du mélange gazeux. Par analyse dimensionnelle,  $\mu_t$  est reliée à l'échelle intégrale  $l$  et à la fluctuation de la vitesse  $\mathbf{u}'$  par [16] :

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (3.46)$$

où  $\tilde{\epsilon}$  est le taux de dissipation turbulent de  $\tilde{k}$ .

Si on admet une isotropie locale de la turbulence, l'équation de transport de  $\tilde{k}$  est obtenue par sommation de la trace du tenseur de contrainte de Reynolds :

## Chapitre III

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) - P_k - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (3.47)$$

L'équation de transport de  $\tilde{\varepsilon}$  peut être modélisée de façon analogue à celle de  $\tilde{k}$  donnant :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) - C_{\varepsilon 1} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{\varepsilon} \quad (3.48)$$

avec le taux de production de l'énergie de turbulence donné par :

$$P_k = \mu_t \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \left( \bar{\rho} \tilde{k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_i} \quad (3.49)$$

Les constantes du modèle  $k - \varepsilon$  sont tabulées ci-dessous [11,13] :

**Tableau III.2 :** Valeurs des constantes du modèle  $k - \varepsilon$

Symbole	Valeur
$C_\mu$	0.09
$\sigma_k$	1.0
$\sigma_\varepsilon$	1.3
$C_1$	1.44
$C_2$	1.92

Une discussion détaillée de la dérivation de ces équations est trouvée dans la référence [17].

Avec ce jeu de constantes, le modèle  $k - \varepsilon$  calcule avec précision plusieurs types d'écoulements libres et confinés. Cependant, il est bien connu qu'il surestime l'épanouissement dans les écoulements des jets axisymétriques. Plusieurs tentatives de corrections ont porté sur la modification des constantes du modèle.

La résolution complète des équations régissant les phénomènes de combustion est difficile, surtout lorsqu'il faut intégrer dans les équations de la turbulence. D'un autre côté, la turbulence est un facteur tellement essentiel à la combustion que toute modélisation de la combustion qui se fait sans tenir compte de ce phénomène conduira forcément à des résultats imprécis.

Dans le chapitre suivant nous allons essayer d'établir en utilisant le logiciel "*Fluent*" l'influence de l'injection d'eau sur la température de la flamme et la concentration des produits en  $\text{NO}_x$ . Les deux cas d'une flamme de diffusion et d'une flamme de pré-mélange seront considérés. Les résultats obtenus seront ensuite confrontés à ceux de la flamme d'équilibre obtenus au chapitre (II)

## Chapitre IV

# **Résolution des équations de la combustion avec injection d'eau à l'aide du logiciel *Fluent***

# Chapitre IV

## 1. Introduction

*Fluent* est un logiciel de modélisation et simulation numérique des écoulements de fluides réactifs ou non, compressibles ou incompressibles, impliquant des phénomènes physiques complexes tels que la turbulence, le transfert thermique, la diffusion thermique, les écoulements multiphasiques, les écoulements dans les moteurs thermiques et les machines tournantes...etc, et ce, pour des géométries simples et complexes notamment en 2D et 3D.

Le Fluent comprend le solveur et le post-Processing

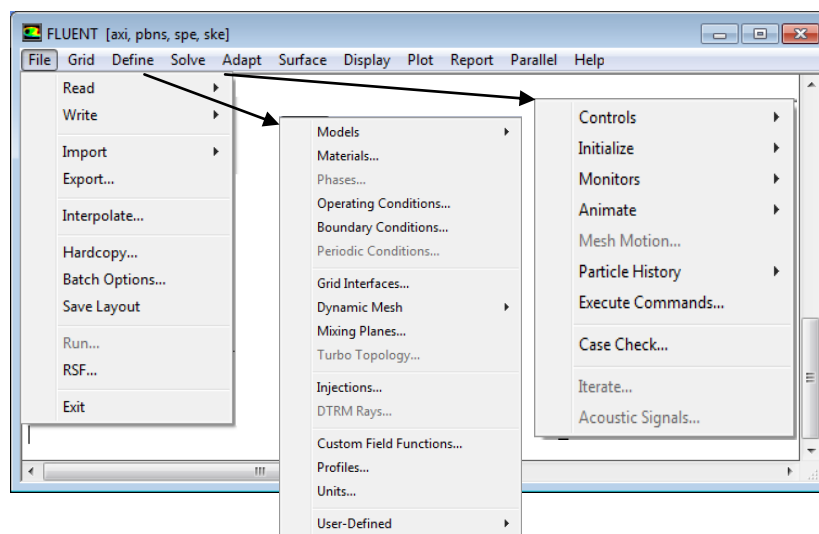
## 2. Le solveur

Il sert à définir les données du problème tel que la géométrie, l'écoulement, les propriétés du fluide utilisé (la composition chimique du mélange dans notre cas), le matériau des parois, les conditions aux limites, il sert également à introduire une solution initiale nécessaire pour lancer les calculs.

Les opérations de calculs sont les suivantes :

- ✓ Importer et dimensionner le maillage.
- ✓ Sélectionner le modèle physique.
- ✓ Définir les propriétés des matériaux.
- ✓ Définir les conditions de calcul.
- ✓ Définir les conditions aux limites.
- ✓ Fournir une solution initiale.
- ✓ Régler les paramètres du Solveur.
- ✓ Régler le moniteur de convergence.
- ✓ Lancer le calcul et surveiller la solution

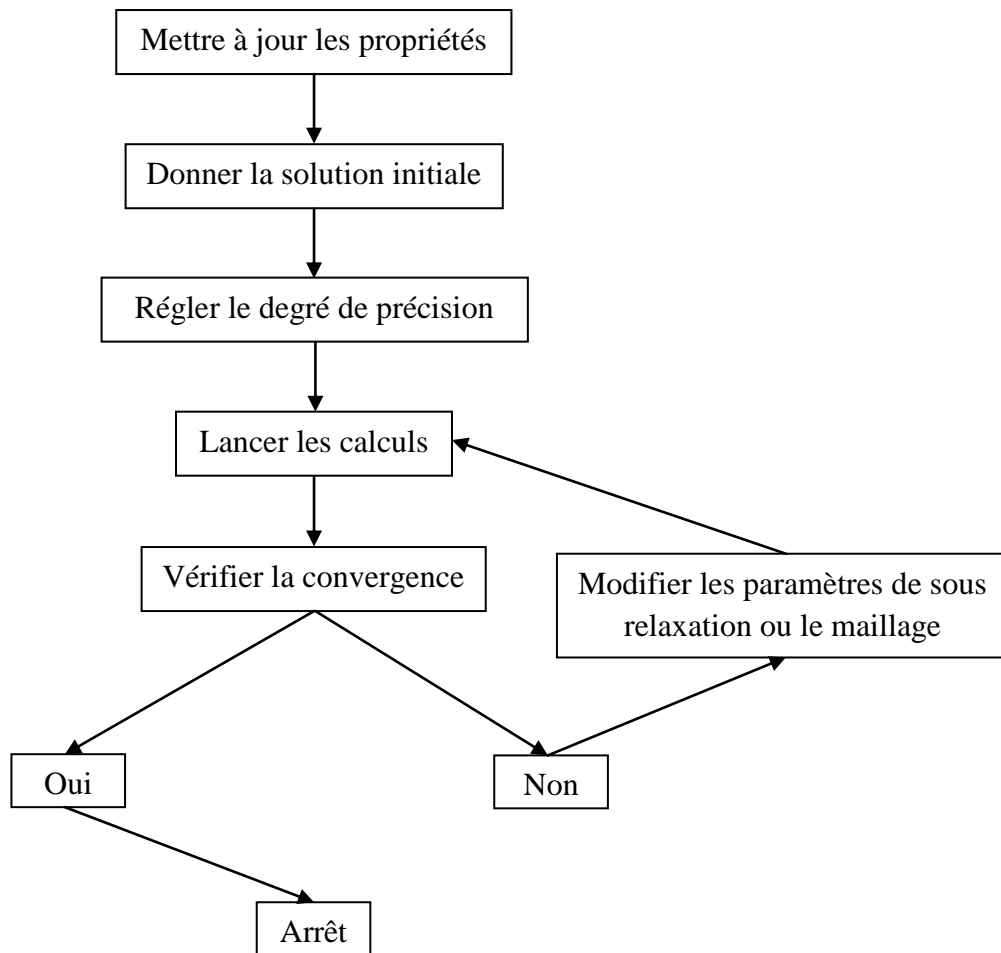
La figure suivante représente le menu du solveur tel que les opérations se font de gauche à droite :



**Fig.IV.1 : Menu du Solveur**

## Chapitre IV

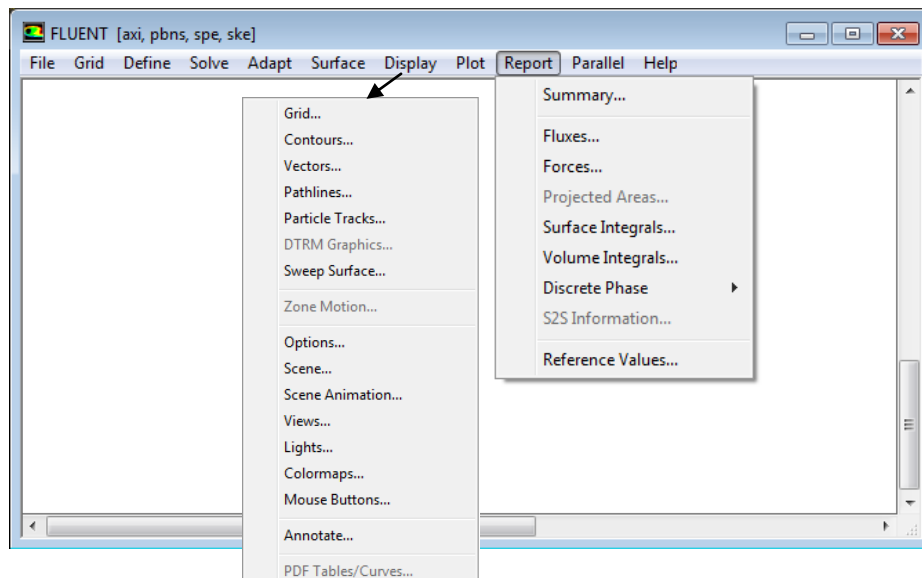
L'exécution des tâches du solveur se fait selon l'organigramme suivant :



**Fig.IV.2 : Organigramme de calcul**

### 3. Le post-Processing

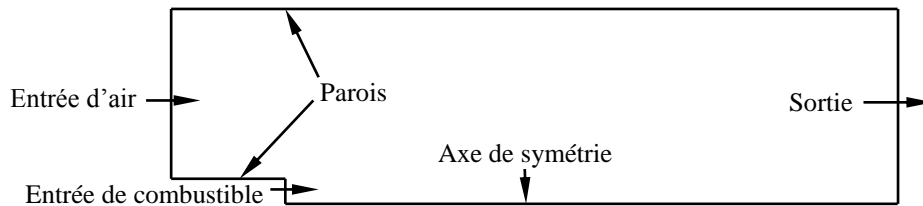
Le post-processing, dont l'interface est représentée à la figure (IV.3), a pour but l'affichage des résultats de la modélisation et les profils des différents paramètres du problème.



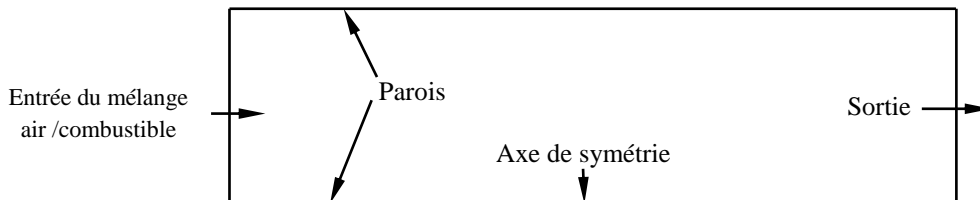
**Fig.IV.3 : Opérations du post-processing**

### 4. Description du problème

La chambre de combustion considérée est un cylindre de longueur 1.2 m. L'entrée du mélange air/combustible se fait par un injecteur de 225 mm de diamètre pour le cas d'une flamme de diffusion. Par ailleurs, pour le cas de la combustion pré-mélangée, l'air débouche dans la chambre d'une distance de 150 mm à l'aide d'un injecteur de 220 mm de diamètre et le combustible par un injecteur de 5 mm de diamètre. En raison de l'axisymétrie, on considère une tranche d'épaisseur d'une maille; ce qui rend le problème bidimensionnel.



**Fig.IV.4 : Géométrie de la chambre de combustion (flamme de diffusion)**



**Fig.IV.5 : Géométrie de la chambre de combustion (flamme de pré-mélange)**

### 5. Conditions aux limites et maillage

Au chapitre (II), la résolution des équations de combustion à l'équilibre pour le gaz naturel et pour le méthane a donné des résultats quasiment identiques en ce qui concerne la température de flamme et les teneurs des produits notamment pour certaines espèces comme les  $\text{NO}_x$  sur lesquels est porté l'intérêt de cette étude. Par ailleurs, l'adoption du gaz naturel, qui comporte plusieurs composants, comme combustible ici nécessiterait des données que nous n'avons pas pu trouver (comme par exemple, les constantes qui interviennent dans l'équation d'Arrhénius : l'énergie d'activation, la constante de température et le facteur pré-exponentiel). En revanche, pour le méthane le logiciel Fluent dispose des données nécessaires, nous avons donc décidé d'utiliser le méthane sachant que son comportement est très semblable à celui du gaz naturel dont il est de loin le principal constituant, ceci ayant été constaté à travers les résultats obtenus au chapitre (II).

#### 5.1. Flamme de diffusion

Dans le cas d'une flamme de diffusion, le combustible doit être introduit à une grande vitesse pour que la diffusion puisse s'opérer suffisamment dans l'air qui doit être introduit à faible vitesse. Nous avons donc choisi une valeur de 80 m/s pour la vitesse d'introduction du combustible, la vitesse qui en résulte pour l'air étant cent fois plus faible.

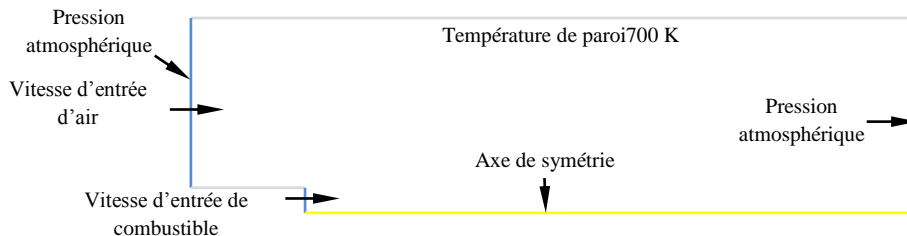
## Chapitre IV

Le tableau (IV.1) présente la composition massique des réactifs pour les différents teneurs en eau utilisées.

**Tableau IV.1 :** Composition massique des réactifs pour différents teneurs en eau : cas de la flamme de diffusion

Teneurs de l'air en H <sub>2</sub> O (%)	Combustible	Composition massique de l'air humide		
	CH <sub>4</sub> (kg de CH <sub>4</sub> /kg de CH <sub>4</sub> )	O <sub>2</sub> (kg de O <sub>2</sub> /kg d'air)	H <sub>2</sub> O (kg de H <sub>2</sub> O/kg d'air)	N <sub>2</sub> (kg de N <sub>2</sub> /kg d'air)
0	1	0.23	0	0.77
10	1	0.218	0.065	0.717
20	1	0.201	0.135	0.664
30	1	0.184	0.211	0.605
40	1	0.165	0.29	0.545

Les conditions aux limites sont schématisées sur la figure suivante :

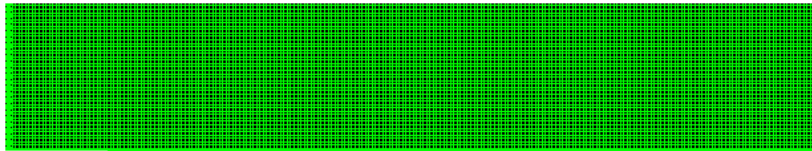


**Fig.IV.6 :** Conditions aux limites (flamme de diffusion)

### Le maillage

La géométrie de la chambre de combustion est réalisée à l'aide du mailleur *Gambit*.

Le maillage est de forme quadrilatérale, il est constitué de 12949 nœuds (Fig.IV.7). Etant donné, l'hétérogénéité de la zone d'entrée, caractérisée par des gradients de concentrations et de vitesse, on a adopté un maillage envisagé un affinage de cette zone.



**Fig.IV.7 :** Maillage de la chambre de combustion dans le cas de flamme de diffusion

### 5.2. Flamme de pré-mélange

La vitesse d'entrée du mélange air/combustible est fixée à 0.8 m/s. Cette valeur correspond approximativement à celles rencontrées dans les problèmes de combustion du même type que le notre, rencontrés dans la littérature [11,13].

La composition massique des réactifs est présentée au tableau ci-après pour les différents teneurs de l'air en eau considérées :

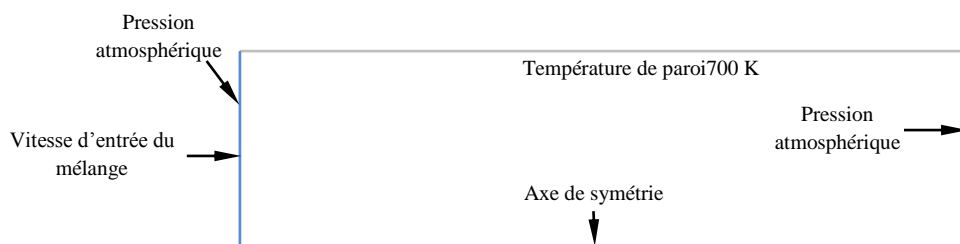


## Chapitre IV

**Tableau IV.2 :** Composition massique des réactifs pour différentes teneurs en eau : cas de la flamme de pré-mélange

Teneurs de l'air en H <sub>2</sub> O (%)	Composition massique du mélange			
	CH <sub>4</sub> (kg de CH <sub>4</sub> /kg du mélange)	O <sub>2</sub> (kg de O <sub>2</sub> /kg du mélange)	H <sub>2</sub> O (kg de H <sub>2</sub> O/kg du mélange)	N <sub>2</sub> (kg de N <sub>2</sub> /kg du mélange)
<b>0</b>	0.05	0.22	0	0.73
<b>10</b>	0.0472	0.2077	0.0618	0.6833
<b>20</b>	0.0438	0.1928	0.1290	0.6344
<b>30</b>	0.0401	0.1765	0.2026	0.5808
<b>40</b>	0.0360	0.1587	0.2832	0.5221

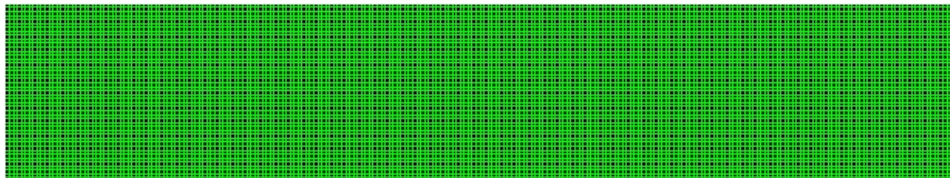
Les conditions aux limites sont schématisées sur la figure suivante :



**Fig.IV.8 :** Conditions aux limites (flamme de pré-mélange)

### Le maillage

Le maillage pour le cas d'une combustion pré-mélangée, est constitué de 11403 nœuds (**Fig.IV.9**) de forme quadrilatérale.



**Fig.IV.9 :** Maillage de la chambre (flamme pré-mélangée)

Les calculs seront exécutés sur fluent dans l'hypothèse d'un régime stationnaire résolvant l'ensemble des équations du mouvement, de la conservation des espèces, de l'énergie et de la turbulence, pour laquelle nous avons retenu le modèle (k-ε) standard. Toutes les diffusions ont été prises en compte et nous avons également considéré que la chaleur spécifique est variable. Le terme dû rayonnement est négligé.

Les résultats des calculs sont présentés au chapitre (V).

## Chapitre V

# **Résultats et interprétation**

# Chapitre V

## 1. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats obtenus au chapitre (II), où nous nous sommes intéressés à la résolution du système d'équations régissant le phénomène de combustion dans les conditions d'équilibre thermodynamique.

Ensuite, nous présenterons les profils des températures et des  $\text{NO}_x$  dans une chambre où a lieu la combustion du méthane dans 110 % d'air théorique pour divers taux d'injection de  $\text{H}_2\text{O}$  et ce, dans le cas d'une flamme de diffusion et dans celui d'une flamme de pré-mélange. Ces profils sont obtenus, comme il a été dit au chapitre (IV), à l'aide du logiciel de CFD "*Fluent*". Enfin, ces profils seront comparés avec ceux obtenus dans le cas de l'équilibre thermodynamique.

## 2. Présentation des résultats des calculs dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre thermodynamique

La résolution des équations régissant la combustion du gaz naturel dans 110 % d'air théorique sous l'hypothèse de l'équilibre thermodynamique a donné la température et la composition des produits figurant sur le tableau (V.I) ci-après.

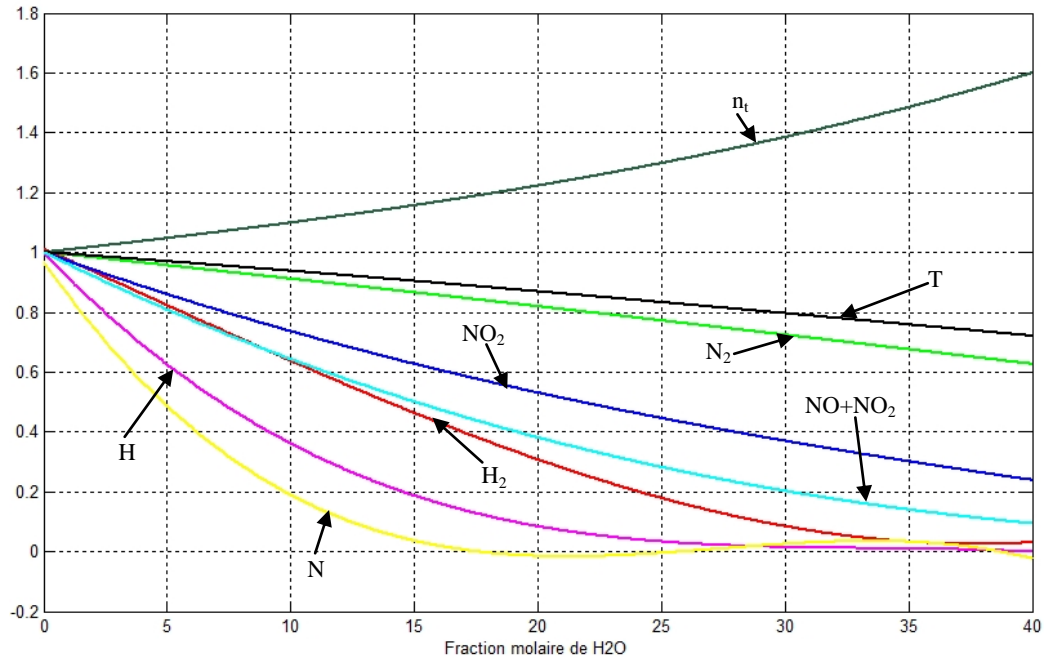
**Tableau V.1 :** Température et composition molaire des produits, calculés à l'équilibre pour la combustion du gaz naturel (GN), en fonction de la teneur en  $\text{H}_2\text{O}$  de l'air de combustion

Teneur de l'air en $\text{H}_2\text{O}$ (%)	0	5	10	15	20	25	30	35	40
CO2	0.0857	0.0836	0.08085	0.0775	0.0738	0.0698	0.0656	0.0613	0.0568
CO	0.0053	0.0033	0.0020	0.0011	0.00055	0.00025	0.00011	0.00004	0.00001
H2O	0.1643	0.2032	0.2426	0.2822	0.3221	0.3621	0.4023	0.4427	0.4834
O2	0.0177	0.0165	0.0154	0.0144	0.0136	0.0128	0.0121	0.0114	0.0106
O ( $\times 10^3$ )	0.4822	0.3025	0.1804	0.1016	0.0536	0.0263	0.0119	0.0049	0.0019
NO ( $\times 10^2$ )	0.4035	0.3263	0.2593	0.2018	0.1534	0.1135	0.0815	0.0564	0.0376
OH ( $\times 10^2$ )	0.4120	0.3419	0.2698	0.2026	0.1445	0.0977	0.0624	0.0375	0.0212
H2 ( $\times 10^2$ )	0.1893	0.1592	0.1222	0.0860	0.0554	0.0327	0.0177	0.0087	0.0039
H ( $\times 10^3$ )	0.3189	0.1997	0.1139	0.0590	0.0276	0.0116	0.00433	0.0014	0.0004
N2	0.7161	0.6846	0.6524	0.6197	0.5863	0.5525	0.5182	0.4836	0.4485
N ( $\times 10^7$ )	0.1839	0.0802	0.0316	0.0111	0.0034	0.0009	0.0002	0.00004	0.000007
NO2 ( $\times 10^5$ )	0.1306	0.1122	0.0960	0.0819	0.0694	0.0582	0.0482	0.0392	0.0312
$n_t$	12.273	12.844	13.482	14.200	15.012	15.936	16.994	18.215	19.644
T	2247	2178	2106	2031	1952	1871	1788	1703	1619
NO <sub>x</sub> ( $\times 10^2$ )	0.4037	0.3265	0.2593	0.2019	0.1535	0.1136	0.0008	0.0006	0.0004

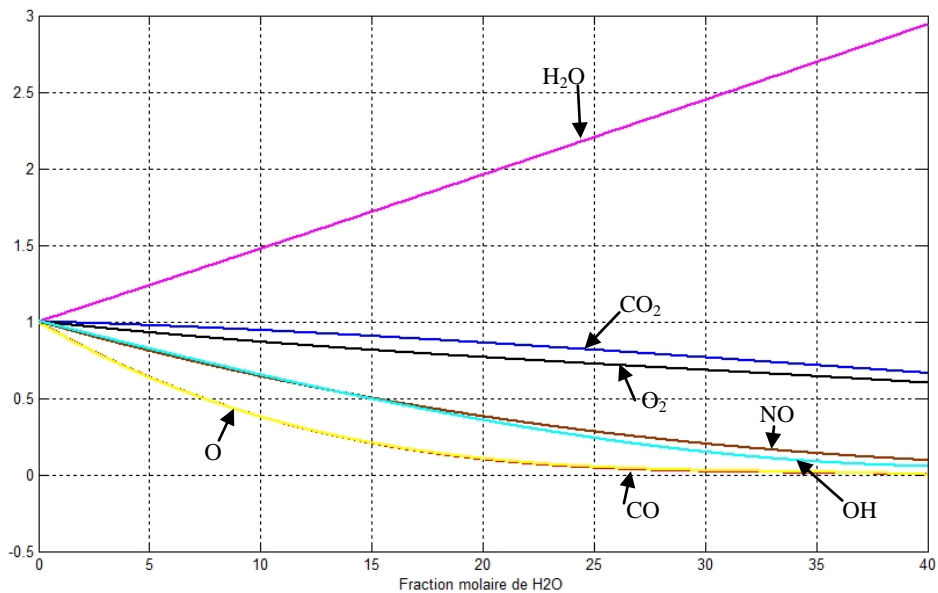
A partir de ce tableau, nous avons représenté l'évolution de la température et des fractions molaires des différentes espèces présentes dans les produits, en fonction de la teneur de l'air de combustion, sur les figures (V.1) et (V.2). Afin que l'allure de l'évolution de la composition de chacune des espèces soit différenciée et facilement lisible sur les graphes, nous avons opté pour une représentation adimensionnalisée, en prenant pour référence la température et la composition correspondant à la combustion sans injection d'eau. Pour présenter les courbes d'évolution directement sans les adimensionnalités, il aurait été nécessaire d'adopter quasiment une échelle différente pour chacune des espèces, une telle façon de faire a donné lieu à la figure (V.3) où on a représenté les courbes d'évolution des fractions molaires de quelques espèces en fonction de la température.

## Chapitre V

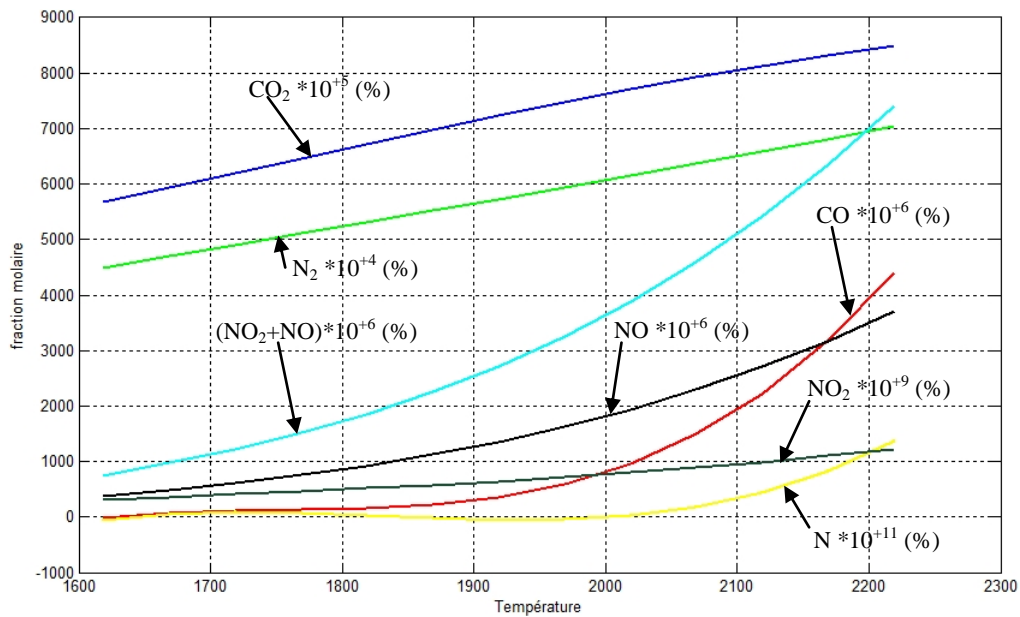
Il est évident que la lecture des résultats présentés sous cette forme là présente quelques difficultés, étant donné qu'on est invité à intégrer des échelles de lecture différentes selon l'espèce considérée.



**Fig.V.1: Fractions molaires des différents produits et température adimensionnalisées de la combustion du GN à l'équilibre en fonction de la teneur en H<sub>2</sub>O de l'air de combustion : H<sub>2</sub>, H, N<sub>2</sub>, N, NO<sub>2</sub>, NO+NO<sub>2</sub>, n<sub>t</sub> et T**



**Fig.V.2 : Fractions molaires adimensionnalisées des différents produits de la combustion du GN à l'équilibre en fonction de la teneur en H<sub>2</sub>O de l'air de combustion : CO<sub>2</sub>, CO, H<sub>2</sub>O, O<sub>2</sub>, O, NO et OH**



**Fig.V.3 : Fractions molaires de divers produits de la combustion du GN à l'équilibre en fonction de la température :  $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{N}$ ,  $\text{NO}_2$  et  $\text{NO} + \text{NO}_2$**

La première observation qui se dégage de ces résultats est que l'injection d'eau entraîne une baisse de température des produits presque linéaire. Cette baisse de la température s'accompagne d'une réduction des teneurs de quasiment tous les produits issus des réactions de dissociation, en particulier les  $\text{NO}_x$ . Il est cependant vrai qu'une partie de cette réduction des teneurs est imputable à la dilution des produits due à la progression de la quantité d'eau injectée, c'est notamment le cas du  $\text{N}_2$  qui devient de moins en moins prédominant à mesure que la quantité d'eau injectée devient plus importante.

En revanche, nous remarquons la quasi-disparition des produits monoatomique au-delà d'un taux d'injection de 25%, pour le  $\text{N}$ , cette disparition se manifeste même à partir d'un taux d'injection d'environ 17%.

En ce qui concerne, la présence des polluants issus de la décomposition de l'azote, à savoir le  $\text{NO}$  et le  $\text{NO}_x$  qui forment les  $\text{NO}_x$ , nous observons que sans injection d'eau, le rapport  $[\text{NO}]/[\text{NO}_2]$  est d'environ 3000, l'injection d'eau ayant un impact plus important sur le  $[\text{NO}]$ , ce rapport n'est plus que d'environ 1200 pour un taux d'injection de 40%.

Les résultats concernant le méthane présentés au tableau (V.2) ont été ajoutés, comme il a été mentionné au chapitre (IV), pour qu'une comparaison des résultats issus des calculs dans les conditions d'équilibre et des calculs exécutés sur "Fluent", calculs que nous ne pouvions réaliser pour le gaz naturel, soit possible.

L'objectif étant d'effectuer cette comparaison sur la base de l'influence du taux d'injection d'eau sur la température et la production des  $\text{NO}_x$ , nous relevons que les résultats du tableau (V.2) pour le méthane soient identiques à ceux du tableau (V.1) pour le gaz naturel. On pourrait donc espérer que les résultats qui vont suivre et qui sont

## Chapitre V

obtenus pour le méthane dans le cas d'une combustion en présence d'une flamme de diffusion puis en présence d'une flamme de pré-mélange, soient semblables à ceux qu'on aurait obtenir avec le gaz naturel comme combustible.

**Tableau V.2 :** Température et composition des produits, calculés à l'équilibre pour le méthane ( $\text{CH}_4$ ), en fonction de la teneur en eau de l'air de combustion

Teneur de l'air en $\text{H}_2\text{O}$ (%)	0	5	10	15	20	25	30	35	40
$\text{CO}_2$	0.0819	0.0794	0.0773	0.0741	0.0706	0.0667	0.0627	0.0585	0.0543
$\text{CO}$	0.0051	0.0044	0.0019	0.0010	0.0005	0.0002	0.0001	0.00004	0.00001
$\text{H}_2\text{O}$	0.1698	0.2098	0.2479	0.2874	0.3271	0.3670	0.4070	0.4472	0.4876
$\text{O}_2$	0.0177	0.0165	0.0153	0.0144	0.0136	0.0129	0.0120	0.0114	0.0107
$\text{O}$ ( $\times 10^3$ )	0.4883	0.2424	0.1822	0.1024	0.0539	0.0264	0.0119	0.0049	0.0019
$\text{NO}$ ( $\times 10^2$ )	0.4048	0.3278	0.2599	0.2022	0.1536	0.1136	0.0815	0.0564	0.0375
$\text{OH}$ ( $\times 10^2$ )	0.4223	0.3132	0.2746	0.2055	0.1462	0.0986	0.0629	0.0377	0.0212
$\text{H}_2$ ( $\times 10^2$ )	0.1983	0.1598	0.1261	0.0881	0.0565	0.0333	0.0179	0.0088	0.0039
$\text{H}$ ( $\times 10^3$ )	0.3300	0.2484	0.1167	0.0602	0.0279	0.0117	0.0044	0.0014	0.0004
$\text{N}_2$	0.7143	0.6883	0.6505	0.6178	0.5845	0.5506	0.5164	0.4817	0.4467
$\text{N}$ ( $\times 10^7$ )	0.1881	0.0882	0.0321	0.0112	0.0035	0.0009	0.0002	0.00004	0.000007
$\text{NO}_2$ ( $\times 10^5$ )	0.1306	0.0659	0.0961	0.0819	0.0695	0.0583	0.0482	0.0393	0.0312
$n_t$	11.486	11.932	12.623	13.297	14.059	14.928	15.921	17.069	18.410
<b>T (K)</b>	2249	2186	2108	2032	1953	1871	1788	1704	1619
$\text{NO}_x$ ( $\times 10^2$ )	0.4049	0.3279	0.2600	0.2023	0.1537	0.1137	0.0815	0.0565	0.0376

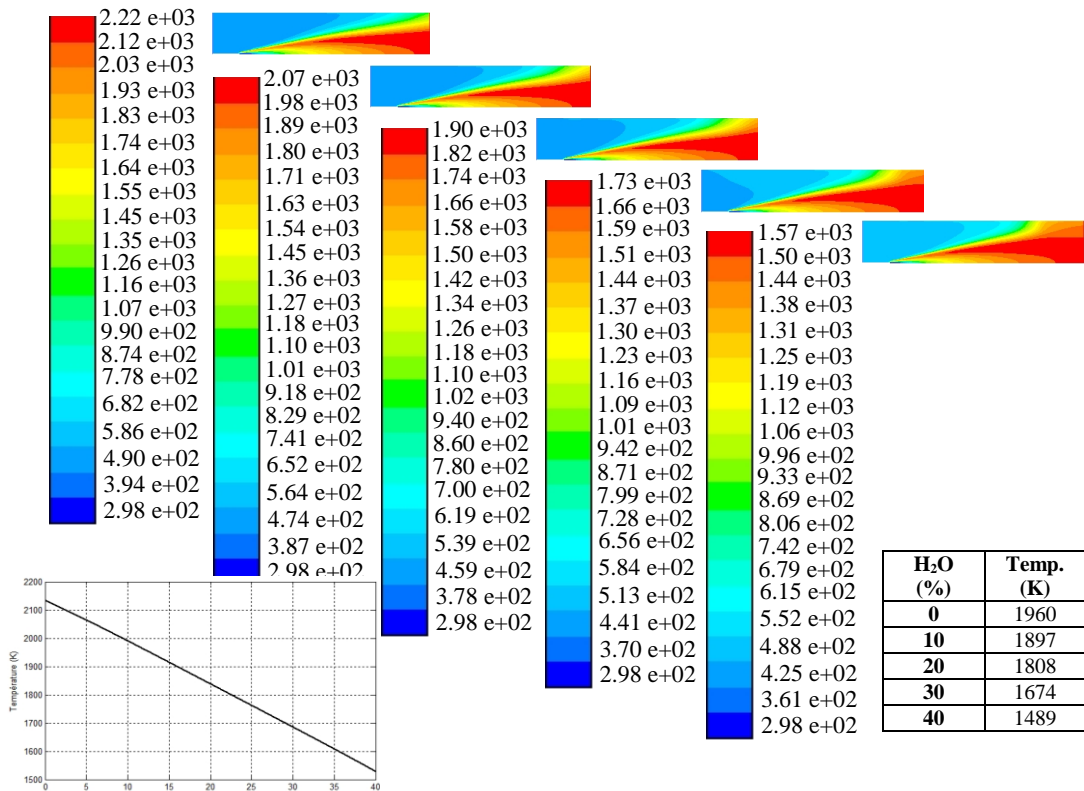
### 3. Présentation des résultats des calculs sur "Fluent" pour la combustion du méthane

Les résultats obtenus par les calculs exécutés à l'aide de "Fluent" sont présentés sur les figures (V.4) et (V.5). Il s'agit des profils des températures et des  $\text{NO}_x$  à travers la chambre de combustion pour une flamme de diffusion et pour une flamme de pré-mélange. Dans chacun de ces deux cas, les profils sont présentés pour cinq taux d'injection d'eau.

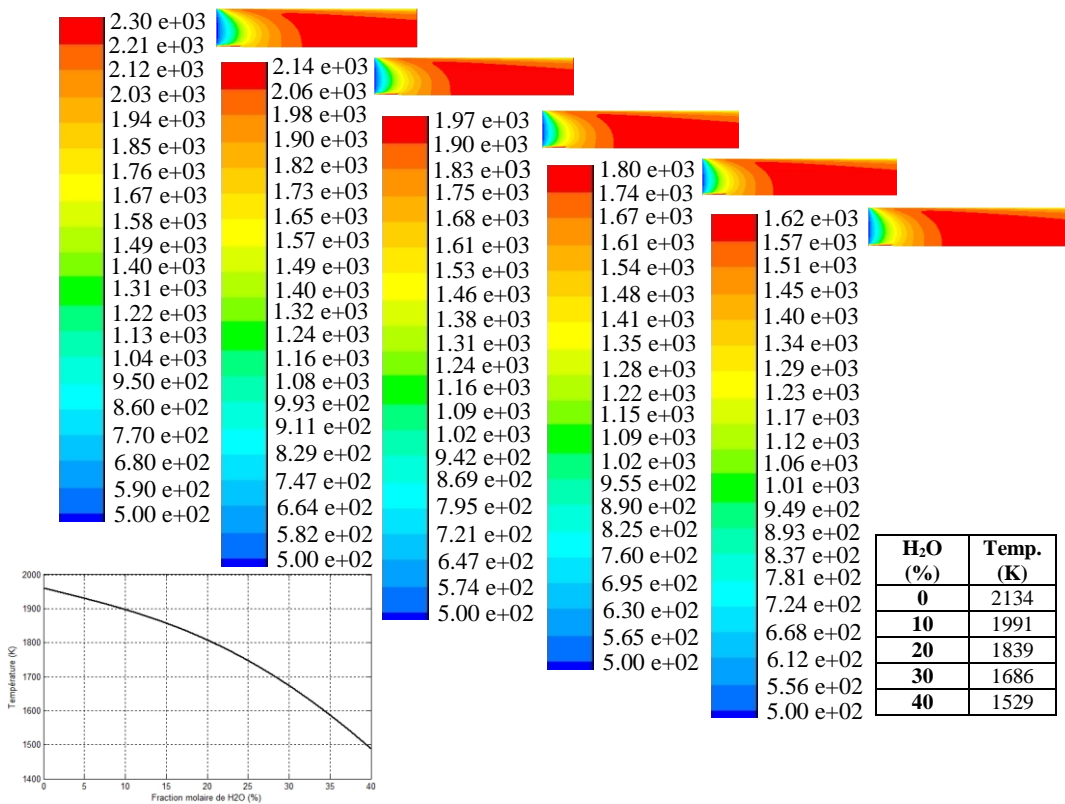
Dans le cas des profils correspondants aux flammes de diffusions, les nuances des couleurs permettent de distinguer parfaitement les zones riches en comburant (au contact des parois) et celles riches en combustible qui produit les gaz brûlés à mesure que l'air traverse la zone de transition par diffusion et convection et va à la rencontre du combustible qui diffuse lui également dans l'air générant ainsi une zone occupée par les gaz brûlés en forme de cône dont le sommet est formé à la sortie du brûleur. Par ailleurs, toujours dans le cas des flammes de diffusion les zones en rouge sur les profils des  $\text{NO}_x$ , correspondent aux endroits de la chambre de combustion où les phénomènes de diffusion amènent l'air et le  $\text{CH}_4$  à se rencontrer dans des proportions stœchiométriques.

Dans le cas des flammes de pré-mélange, les profils des températures et des concentrations en  $\text{NO}_x$  présentent tous, bien différenciées, les trois zones qui caractérisent les flammes de pré-mélange à savoir, en progressant de l'entrée vers la sortie, la zone de pré-mélange, la zone de réaction moyenne et la zone des gaz brûlés où les températures maximales sont atteintes, accompagnées des taux des  $\text{NO}_x$  les plus importants.

# Chapitre V



a - cas d'une flamme de diffusion

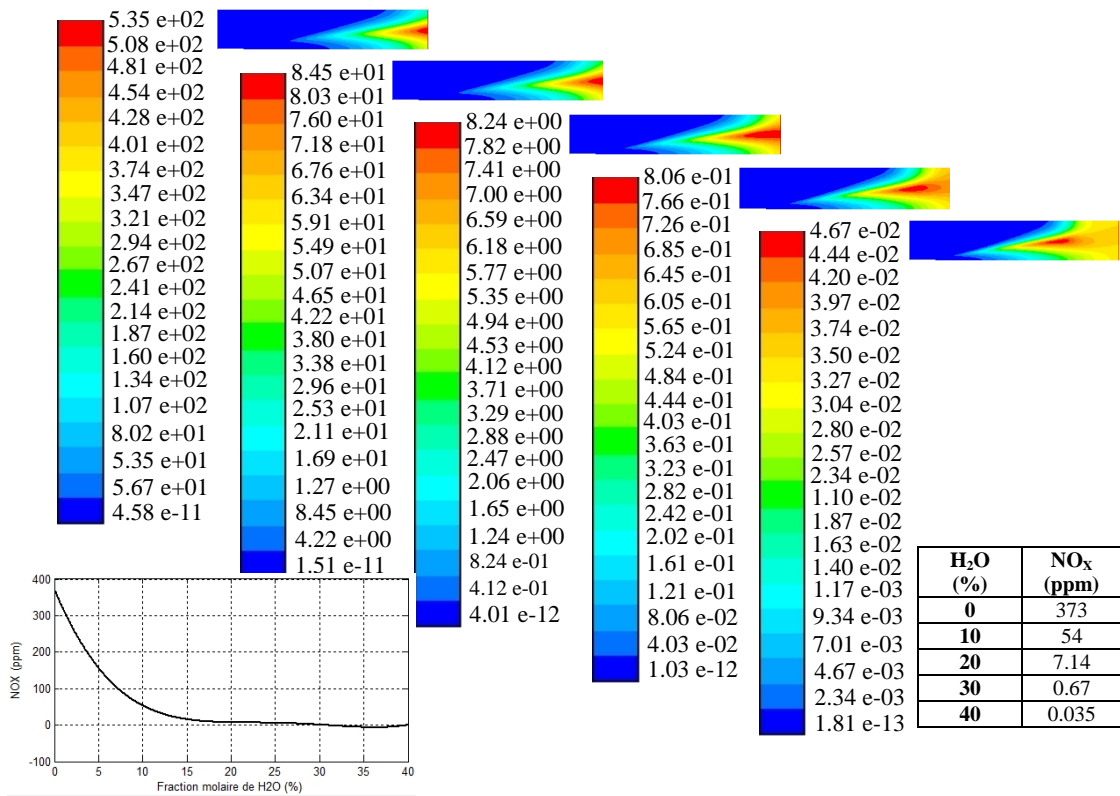


b - Cas d'une flamme de pré-mélange

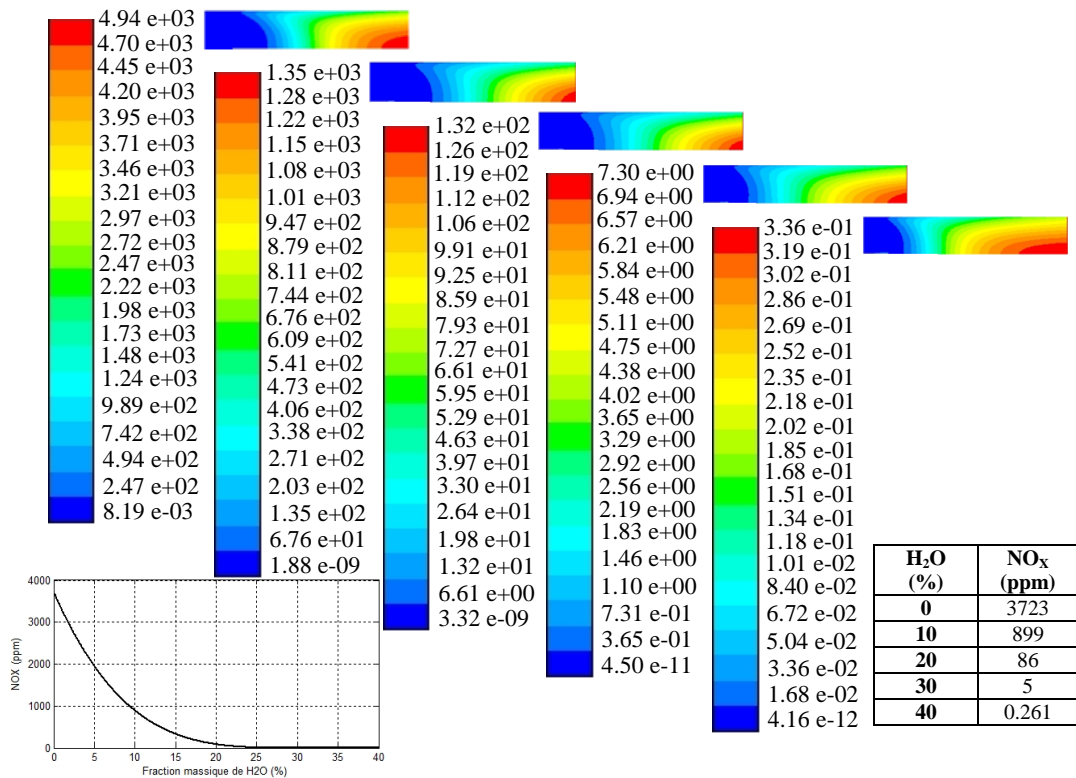
**Fig.V.4 : Distribution des Températures dans une chambre de combustion où à lieu la combustion du CH<sub>4</sub> pour différentes teneurs en H<sub>2</sub>O de l'air de combustion**



# Chapitre V



a - Cas d'une flamme diffusion



b – Cas d'une flamme de pré-mélange

**Fig.V.5 : Distribution des NO<sub>x</sub> dans une chambre de combustion où à lieu la combustion du CH<sub>4</sub> pour différentes teneurs en eau de l'air de combustion**



### 4. Comparaison

Les résultats principaux des trois cas de combustion du CH<sub>4</sub> considérés sont récapitulés au tableau comparatif (V.3) ci-dessous. Il s'agit des températures et des concentrations des NO<sub>x</sub> pour les trois types de flammes considérées. Dans le cas des flammes de diffusion et de pré-mélange, nous avons présenté les températures et les concentrations des NO<sub>x</sub> moyennées à la sortie de la chambre de combustion ainsi que les températures maximales enregistrées dans la chambre. Les résultats sont représentés également sur les figures (V.6) pour les températures et (V.7) pour les concentrations des NO<sub>x</sub>.

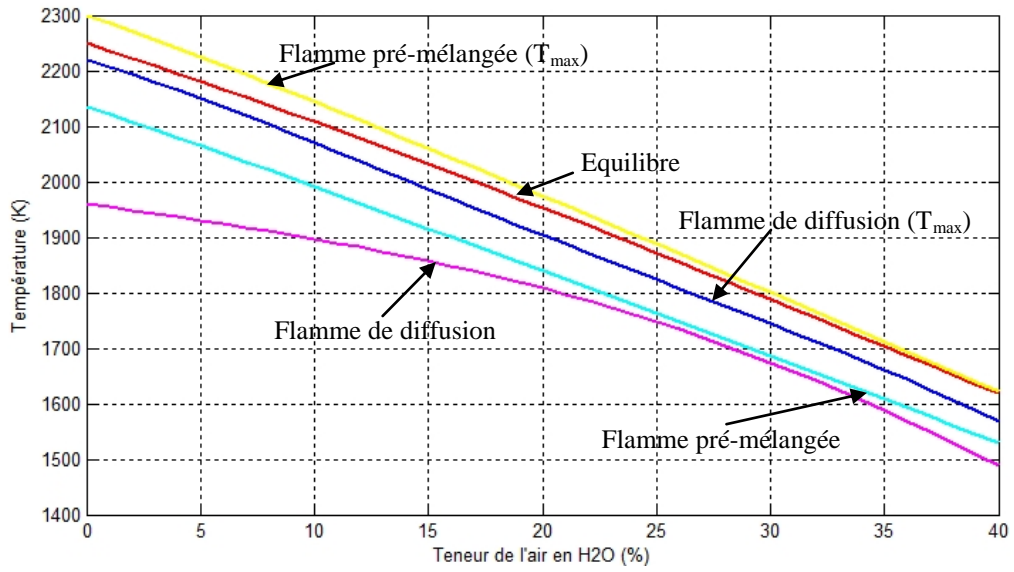
**Tableau V.3 :** Tableau comparatif des températures et des produits de la combustion du CH<sub>4</sub> en H<sub>2</sub>O ; NO<sub>x</sub> ; et en fonction de la teneur en H<sub>2</sub>O de l'air de combustion pour les trois cas considérés : Equilibre ; Flamme de diffusion ; Flamme de pré-mélange

Teneur molaire de l'air en H <sub>2</sub> O		Température (K)		Fractions molaires		
				H <sub>2</sub> O	NO <sub>x</sub>	
					(x10 <sup>5</sup> )	(ppmvs)
<b>0</b>	Equilibre	<b>2249</b>		<b>0.1699</b>	<b>405</b>	<b>4879</b>
	Diffusion	<b>2218</b>	<b>1960</b>	<b>0.1663</b>	<b>34</b>	<b>373</b>
	prémélange	<b>2300</b>	<b>2134</b>	<b>0.1725</b>	<b>333</b>	<b>3723</b>
<b>10</b>	Equilibre	<b>2108</b>		<b>0.2480</b>	<b>260</b>	<b>3457</b>
	Diffusion	<b>2070</b>	<b>1897</b>	<b>0.2519</b>	<b>6</b>	<b>54</b>
	prémélange	<b>2144</b>	<b>1991</b>	<b>0.2669</b>	<b>76</b>	<b>900</b>
<b>20</b>	Equilibre	<b>1953</b>		<b>0.3272</b>	<b>154</b>	<b>2289</b>
	Diffusion	<b>1904</b>	<b>1808</b>	<b>0.3287</b>	<b>0.6</b>	<b>7</b>
	Prémélange	<b>1974</b>	<b>1839</b>	<b>0.3270</b>	<b>7</b>	<b>86</b>
<b>30</b>	Equilibre	<b>1788</b>		<b>0.4070</b>	<b>82</b>	<b>1383</b>
	Diffusion	<b>1744</b>	<b>1674</b>	<b>0.4044</b>	<b>0.05</b>	<b>0.7</b>
	Prémélange	<b>1800</b>	<b>1686</b>	<b>0.4062</b>	<b>0.4</b>	<b>5.1</b>
<b>40</b>	Equilibre	<b>1619</b>		<b>0.4877</b>	<b>38</b>	<b>742</b>
	Diffusion	<b>1568</b>	<b>1489</b>	<b>0.4706</b>	<b>0.002</b>	<b>0.035</b>
	prémélange	<b>1622</b>	<b>1529</b>	<b>0.4863</b>	<b>0.02</b>	<b>0.261</b>

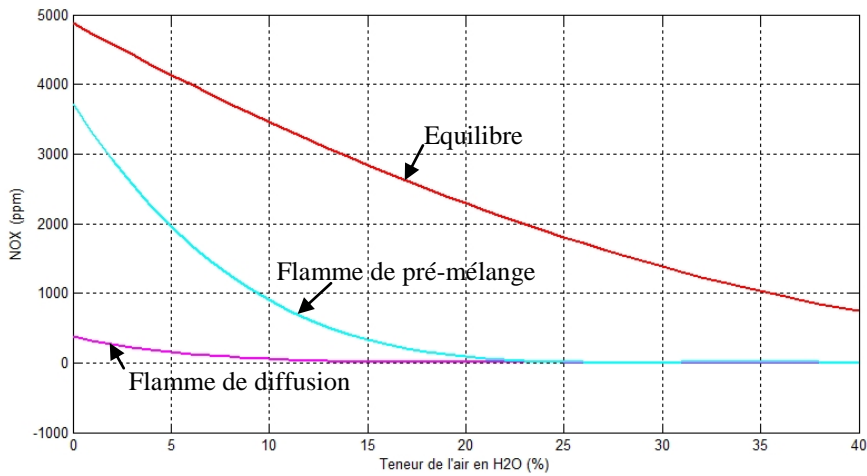
En ce qui concerne la température, nous relevons que seule la température maximale correspondant à la flamme de pré-mélange reste supérieure à celle de la flamme d'équilibre et que la flamme de diffusion est celle qui présente la température la plus basse, comme il fallait s'y attendre. Dans tous les cas, la température diminue avec la teneur en eau de l'air de combustion.

Pour les NO<sub>x</sub>, représentés en ppm sur une base volumique du gaz sec, on remarque que la flamme de diffusion est celle qui produit le moins de ce polluant, mais que pour la flamme de pré-mélange le résultat n'est pas mal non plus étant donné qu'au-dessus d'un taux d'injection de 20% de H<sub>2</sub>O dans l'air, la teneur en NO<sub>x</sub> sera inférieure à 86 ppmvs, valeur qui est largement au-dessous de la plupart des normes actuellement en vigueur en matière de limitation des émissions des NO<sub>x</sub>. Quant à la flamme d'équilibre, les résultats montrent que, même si l'injection d'eau entraîne une réduction des NO<sub>x</sub>, leur concentration reste importante.

## Chapitre V



**Fig.V.6 : Profils des températures de flammes de combustion du  $\text{CH}_4$  en fonction de la teneur en  $\text{H}_2\text{O}$  de l'air de combustion pour les flammes d'équilibre, de diffusion et de pré-mélange**



**Fig.V.7 : Teneur en  $\text{NO}_x$  des produits de la combustion du  $\text{CH}_4$  en fonction de la teneur en  $\text{H}_2\text{O}$  de l'air de combustion pour les flammes d'équilibre, de diffusion et de pré-mélange**

## Conclusion générale

---

### Conclusion générale

Aujourd'hui, il est prouvé que l'humidification intensive de l'air de combustion dans les installations de production d'électricité utilisant la turbine à gaz conduit à des améliorations substantielles de la puissance et du rendement. Parmi les problèmes qui constituent des obstacles à la généralisation de la pratique de l'humidification sur les cycles modernes de la turbine à gaz, la difficulté à réaliser la combustion dans une atmosphère trop humide n'est pas des moindres. Toutefois, des chercheurs rapportent que dans un avenir très proche, on pourrait stabiliser la flamme de combustion en présence d'un taux d'humidité qui avoisinerait 35 % voire 40 %.

Dans le cadre de ce travail, nous nous sommes placés dans l'hypothèse d'une flamme stable même avec un taux d'humidification de 40 %, et nous avons essayé d'analyser l'impact de l'humidification sur la température de la flamme et sur la composition des produits, notamment leur teneur en oxydes d'azote, polluants toxiques et à l'origine des pluies acides. Etant donné la complexité mathématique de l'ensemble des équations générales qui décrivent les phénomènes associés dans les interactions de la combustion, nous avons adopté une approche très simplificatrice, en analysant le problème sous l'angle de l'équilibre thermodynamique, puis en affinant les résultats obtenus par l'établissement des champs de température et de concentration en  $[\text{NO}_x]$  dans une chambre de combustion bidimensionnelle en régime stationnaire. Nous avons considéré le cas d'une flamme de diffusion, puis celui d'une flamme de pré-mélange. Les trois cas considérés conduisent à la même conclusion sur le plan qualitatif, à savoir une baisse régulière de la température à mesure que le taux d'humidité de l'air de combustion augmente, accompagnée d'une baisse des taux d'émission des  $\text{NO}_x$ . Cependant nous avons noté que pour les  $\text{NO}_x$ , la réduction des taux n'est pas seulement due à la baisse de la température, mais également à la disparition de l'azote monoatomique au dessus d'un certain taux d'injection. C'est ainsi que les teneurs en  $\text{NO}_x$  sont amenées à des niveaux très bas, en dessous des normes les plus restrictives, dès que le taux d'injection dépasse 20 %, sauf pour la flamme d'équilibre qui, du reste correspond à une solution idéalisée.

### **Bibliographie :**

- [1]. Benoît TAUPIN ; Etude de la combustion turbulente à faible richesse haute température et haute pression ; Thèse doctorale ; Institut National des Sciences Appliquées de Rouen; France ; 2003 ; pp 9-23 ;
- [2]. De Soete ; Aspects physique et chimique de la combustion, Technip ; Edition 1976
- [3]. Rutar.T and Malte.P. Experimental measurements of NO<sub>x</sub> and CO in a Jet-Stirred reactor at pressures of 3.0, 4.7 and 6.5 atm and variable residence times. Fall meeting western states section of the combustion institute, 1998 ; pp 1-12;
- [4]. David Vauchelles ; Etude de la stabilité et des émissions polluantes des flammes turbulentes de pré-mélange pauvre à haute pression appliquées aux turbine à gaz ; Thèse doctorale ; Institut National des Sciences Appliquées de Rouen ; France 2004 ; pp 9-19
- [5]. Choi.G.M, Katsuki.M; Advanced low NO<sub>x</sub> combustion using highly preheated air; Energy Conversion and Management 42, 2001;
- [6]. Gerard Monnot ; la combustion dans les fours et les chaudières ; Technip ; Edition 1987 ;
- [7]. FAWZY EL-MAHALLAWY and SAAD EL-DIN HABIK; Fundamentals and technology of combustion , Elsevier; Edition 2002 ;
- [8]. Commission européenne ; Prévention et réduction intégrées de la pollution Document de référence sur les meilleures techniques disponibles pour les Grandes Installations de Combustion ; Juillet 2006 ;
- [9]. Christian Guilié ; cours de combustion ; première & deuxième partie ; France ; Novembre 2006 ;
- [10]. SONTAG et VAN WEYLEN ; Thermodynamique Appliquée ; John Wiley & Sons ; 2<sup>ème</sup> Edition ;
- [11]. Marco Derksen; On the influence of steam on combustion; Thesis University of Twente; Pays-Bas; 2005; pp 9-47;
- [12]. Centre de recherche sur la combustion turbulente ; Modélisation et simulation numérique de la combustion turbulente ; Laboratoire E.M2.C., C.N.R.S.Ecole Centrale de Paris; France ; pp 1-8 ;
- [13]. Abdelbaki MAMERI ; Etude numérique de la combustion turbulente du pré-mélange pauvre méthane/air enrichi à l'hydrogène ; Thèse doctorale ; Université d'Orléans ; France ; 2009 ; pp 16-59 ;
- [14]. Jaan Kiusalaas; Numerical Methods in Engineering with MATLAB ; CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS; Edition 2005;
- [15]. T. Poinso, D. Veynante, Theoretical and numerical combustion, Edwards ; Edition 2001;

## Bibliographie

---

- [16]. J. Blazek, Computational fluid dynamics: principles and applications, Elsevier ;  
Edition 2001 ;
- [17]. P. Chassaing, Turbulence en mécanique des fluides, Cépaduès ; Eddition 2000 ;
- [18] Poulikkas A., Kellas A.; The use of sustainable combined cycle technologies in  
Cyprus: A case study for the use of LOTHECO cycle ; Renewable and Sustainable  
Energy Reviews ; 2004 ;

### Corrélations des constantes d'équilibre

Les fonctions  $\ln(K) = f(T)$  sont données par des tables par intervalle de 200 K et pour des températures allant de 400 K à 5000 K [10].

Sachant que la dissociation nécessite de l'énergie, on en déduit que la température de flamme sera inférieure à celle qu'on obtient pour une combustion stœchiométrique, soit autour de 2300 K, et supérieure à 1600 K, étant donné qu'à des températures inférieures à cette valeur la dissociation des produits n'est pas significative. Pour obtenir la meilleure précision possible, nous allons donc établir nos corrélations dans le strict intervalle de 1600 K à 2400 K.

Les valeurs de  $\ln(K)$  des différentes réactions de dissociation sont données dans le tableau suivant :

**Tableau A.1** : Logarithme des constantes d'équilibres des différentes réactions de dissociations [10]

Température (K)	1600	1800	2000	2200	2400
<b>Réactions</b>					
$H_2 \rightarrow 2H$	-19.637	-15.866	-12.840	-10.353	-8.276
$O_2 \rightarrow 2O$	-22.285	-18.030	-14.622	-11.827	-9.497
$N_2 \rightarrow 2N$	-56.055	-48.051	-41.645	-36.391	-32.011
$H_2O \rightarrow H_2 + (1/2) O_2$	-11.921	-9.826	-8.145	-6.768	-5.619
$H_2O \rightarrow (1/2) H_2 + OH$	-13.066	-10.657	-8.728	-7.148	-5.832
$CO_2 \rightarrow CO + (1/2) O_2$	-10.830	-8.497	-6.635	-5.120	-3.860
$(1/2) N_2 + (1/2) O_2 \rightarrow NO$	-5.294	-4.536	-3.931	-3.433	-3.019
$N_2 + 2O_2 \rightarrow 2NO_2$	-20.126	-19.577	-19.136	-18.773	-18.470

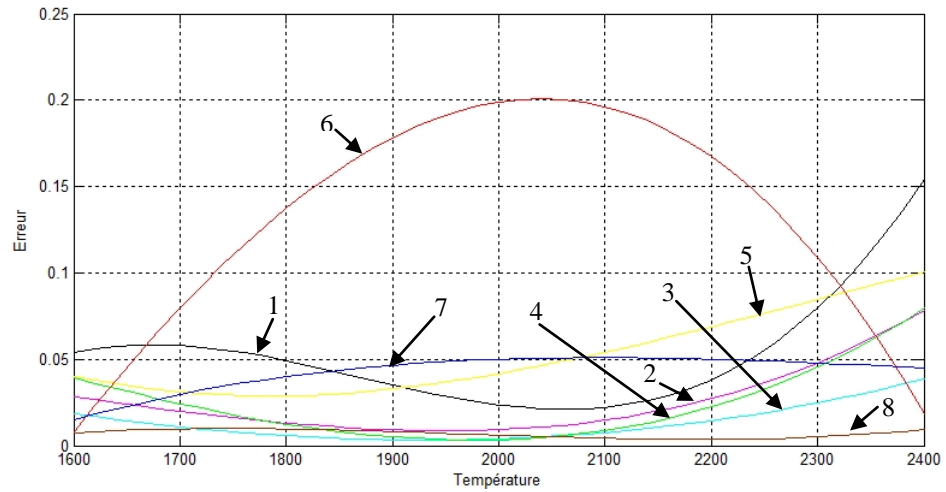
Le tableau ci-après contient les résultats d'interpolation pour les différentes réactions, calculés par Excel :

**Tableau A.2** : Corrélations des constantes d'équilibre des différentes réactions de dissociation

	Réactions	Corrélations	Erreur maxi. (%)
1	$H_2 \rightarrow 2H$	$-54525,74/T + 14,43$	0.16
2	$O_2 \rightarrow 2O$	$-61378,11/T + 16,07$	0.08
3	$N_2 \rightarrow 2N$	$-115399,46/T + 16,06$	0.04
4	$H_2O \rightarrow H_2 + (1/2) O_2$	$-30248,92/T + 6,98$	0.08
5	$H_2O \rightarrow (1/2) H_2 + OH$	$-34722,85/T + 8,63$	0.10
6	$CO_2 \rightarrow CO + (1/2) O_2$	$-33458,05/T + 10,08$	0.21
7	$(1/2) N_2 + (1/2) O_2 \rightarrow NO$	$-10918,47/T + 1,529$	0.08
8	$N_2 + 2O_2 \rightarrow 2NO_2$	$-7948,08/T - 15,16$	0.01

La figure (A.1) montre l'évolution des écarts des valeurs obtenues par ces corrélations par rapport aux valeurs du tableau (A.1).

## Annexe A



**Fig.A.1 : Evolution des écarts des valeurs obtenues par les corrélations des constantes d'équilibre par rapport aux valeurs fournies par les tables**

Les chiffres 1,2,3,4,5,6,7 et 8 se réfèrent aux réactions de dissociations du tableau (A.2).

## Variation d'enthalpie pour les différentes espèces des produits

Les variations d'enthalpie, fonctions de la température s'accordent à des corrélations de la forme :  $\overline{\Delta h} = AT^2 + BT + C$  qui suppose une dépendance linéaire des chaleurs spécifiques vis-à-vis de la température. Nous allons interpoler entre 1600 k et 2400 k pour les raisons cités à l'annexe (A).

Les écarts d'enthalpie des différents constituants des produits par rapport à leur enthalpie de formation standard, sont présentés en (kJ/kmol) au tableau ci-après pour le domaine des températures considéré :

**Tableau B.1 :** Ecarts d'enthalpie en (kJ/kmol) par rapport à l'enthalpie de formation standard en fonction de la température [10]

T (K)	1600	1700	1800	1900	2000	2100	2200	2300	2400
<b>CO<sub>2</sub></b>	67569	73480	79432	85420	91439	97500	103562	109671	115779
<b>CO</b>	42388	45948	49529	53128	56743	60375	64012	67676	71326
<b>O<sub>2</sub></b>	44267	47959	51674	55414	59176	62986	66770	70634	74453
<b>O</b>	27381	29464	31547	33630	35713	37798	39878	41961	44045
<b>H<sub>2</sub>O</b>	52907	57757	62693	67706	72788	77831	83153	88295	93741
<b>H<sub>2</sub></b>	39533	42826	46160	49532	52942	56379	59865	63371	66915
<b>H</b>	27060	29139	31218	33296	35375	37455	39532	41610	43689
<b>OH</b>	40151	43502	46890	50311	53763	57241	60751	64283	67840
<b>N<sub>2</sub></b>	41904	45430	48979	52549	56137	59748	63362	67007	70640
<b>N</b>	27060	29139	31218	33296	35375	37455	39534	41614	43695
<b>NO</b>	43319	46929	50557	54201	57859	61530	65212	68906	72606
<b>NO<sub>2</sub></b>	64846	70414	76008	81624	87259	93274	98578	104263	109948

Les corrélations des variations d'enthalpie en fonction de la température pour les différentes espèces, sont établies à l'aide d'Excel et présentées au tableau ci-dessous :

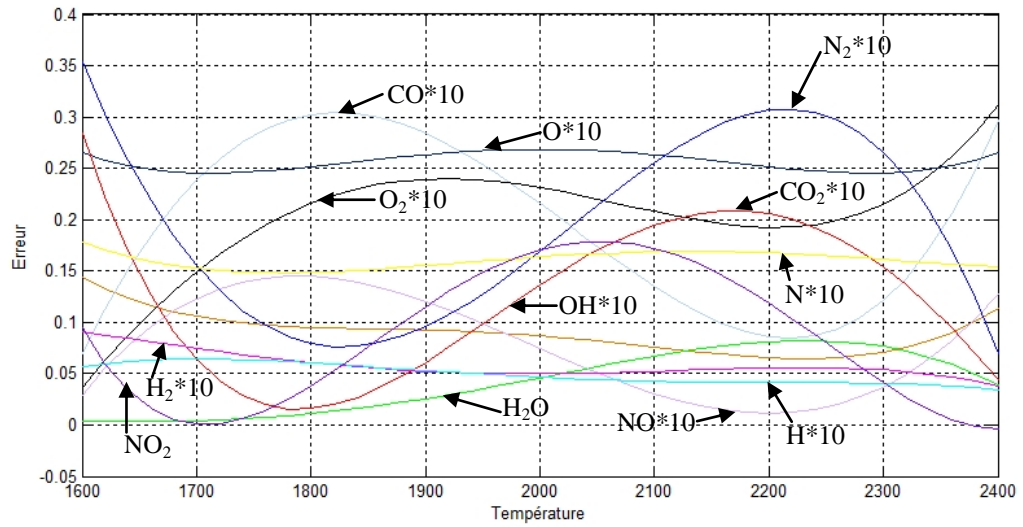
**Tableau B.2 :** Corrélations des variations d'enthalpie  $\Delta h(T)$  en (kJ/kmol) des différentes espèces

Espèces	Corrélations	Erreur max (%)
<b>CO<sub>2</sub></b>	$0.001453 T^2 + 54.478747 T - 23328.692641$	0.015
<b>CO</b>	$0.000717 T^2 + 33.325266 T - 12772.870130$	0.032
<b>O<sub>2</sub></b>	$0.001130 T^2 + 33.236452 T - 11808.047619$	0.032
<b>O</b>	$-0.000004 T^2 + 20.843786 T - 5960.047619$	0.031
<b>H<sub>2</sub>O</b>	$0.003447 T^2 + 37.210855 T - 15454.160173$	0.078
<b>H<sub>2</sub></b>	$0.001774 T^2 + 27.138831 T - 8435.683983$	0.009
<b>H</b>	$-0.000006 T^2 + 20.808511 T - 6219.246753$	0.007
<b>OH</b>	$0.001458 T^2 + 28.793565 T - 9656.813853$	0.029
<b>N<sub>2</sub></b>	$0.000841 T^2 + 32.574632 T - 12375.610390$	0.036
<b>N</b>	$0.000014 T^2 + 20.737255 T - 6154.623377$	0.017
<b>NO</b>	$0.000648 T^2 + 34.028325 T - 12789.069264$	0.015
<b>NO<sub>2</sub></b>	$0.000199 T^2 + 55.662262 T - 24775.904762$	0.307

La figure ci-dessous montre l'évolution des écarts des valeurs obtenues par les corrélations du tableau (B.2) par rapport aux valeurs du tableau (A.1).



## Annexe B



**Fig.B.1 : Evolution des écarts des valeurs obtenues par les corrélations d'enthalpies par rapport aux valeurs fournies par les tables**

## Méthode de calcul et organigramme

### Le système non linéaire comprend

- Huit équations d'équilibre chimique.
- Quatre équations de conservation des éléments chimiques.
- Une équation de normalisation des fractions molaires des différents constituants.
- Une équation résultant du bilan d'énergie.

La résolution du système se fera à l'aide de la méthode des approximations successives dite « méthode de Newton généralisée » [14].

Soit la notation :

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{14} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad f = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{14} \end{pmatrix}$$

Le système peut alors se mettre sous la forme :

$$f(x) = 0$$

Soit  $x^p$  la  $p$  – ième approximation de la solution recherchée, la  $(p + 1)$  – ième approximation sera :

$$x^{p+1} = x^p + \varepsilon^p$$

où  $\varepsilon^p$  est une correction.

A la  $p$  – ième approximation, nous pouvons écrire pour  $x^p$  suffisamment proche de  $x$ :

$$f(x^p + \varepsilon^p) = 0$$

Décomposons en série de Taylor cette fonction par rapport à  $\varepsilon^p$ , en nous bornant aux termes linéaires :

$$f(x^p + \varepsilon^p) = f(x^p) + f'(x^p) \varepsilon^p = 0$$

où  $f'(x^0)$  est la matrice Jacobienne des dérivées de  $f$  par rapport à  $x$ .

ou encore :

$$f'(x^p) \varepsilon^p = -f(x^p)$$

Donc, On a un système linéaire à résoudre à chaque itération.

## Annexe C

### Organigramme

