الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DR. YAHIA FARES DE MEDEA

FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
Département du Génie de la Matière



Mémoire de Fin d'étude

Présenté pour l'obtention du Diplôme
De Master en Génie Mécanique
Option : Energétique et thermique des systèmes

THEME

Etude numérique des conditions de la stabilisation d'une flamme à l'aide du code CHEMKIN

Préparé et présenté par :
ALLAG Radhia
SEDRATI Monira

Proposé et dirigé par:
Dr. Alliche Mounir
MR. BRAHIMI Amine

Promotion : 2015-2016

REMERCIMENTS

Nous tenons à remercier tout d'abord le Dieu qui nous a donné la force, le courage et la patience durant notre étude pour arriver à ce jour-là.

Nous remercions ensuite ***Dr.Alliche*** *et* ***Mr.Brahimi*** *pour son encadrement et leurs conseils, et surtout sa disponibilité le long de notre travail.*

Nous remerciement également les enseignent qui ont contribué à notre formation.

Et tous les enseignants d'université de Médéa, particulièrement les enseignants du département de Génie mécanique.

Enfin, nous adressons aussi nos remerciements à tous ceux qui ont contribué à notre formation de près ou de loin, depuis les premières lettres d'alphabet.

Dédicaces

Je dédie Ce modeste travail en Signe de reconnaissance

ET de respect:

A mes très ***chers parents : Ma mère*** *pour les sacrifices qu'ils ont consentis pour me voir enfin atteindre cet objectif ; Mes frères et mes sœurs.*

A toute ma grande famille ***SEDRATI et AMRIOU***

A mon fiancé et toute la famille ***SLAIME.***

Je Le Dédie A Ma Très Chère binôme ***RADHIA*** *et Tous La Famille.*

Tous mes amis.

A tous les étudiants de ma promotion.

A tous les profs qui ma enseigné du première jusqu'à l'université.

SEDRATI Monira.

Dédicaces

Je dédie Ce modeste travail en Signe de reconnaissance

ET de respect:

A mes très chers parents : Ma mère pour les sacrifices qu'ils ont consentis pour me voir enfin atteindre cet objectif ; Mes frères et mes sœurs.

A toute ma grande famille SEDRATI et AMRIOU

A mon fiancé et toute la famille SLAIM.

Je Le Dédie A Ma Très Chère binôme RADHIA et Tous La Famille.

Tous mes amis.

A tous les étudiants de ma promotion.

A tous les profs qui ma enseigné du primaire jusqu'à l'université.

SEDRATI Monira.

Dédicace

Avec toute sincérité et modestie, et à la fin
De ma formation, je tiens à dédier ce
Modeste Travail :
À Mes plus grands amours après Allah et son
Prophète, Aux prunelles de mes yeux: "Mes
Chères parents" qui ont toujours veillés sur
Nous et sur notre avenir
À Mes chères grandes Parents
À Mes frères
À Mes sœurs
À tout la famille Allag et djazairi
À mon Cher binôme Monira
À mes chères amies
À tous qui mon aider de prés ou de loin même
D'un mot d'encouragement
Sans oublier la promotion de génie mécanique
de 2016

ALLAG Radhia…

Sommaire

Introduction générale :.....1.

Chapitre I : Généralités sur la combustion

I.1 Introduction : .....3.

I.2 Définition de la combustion : .....3.

I .3 Le triangle de feu :…….....…3.

I .3-1 Définition :…….....3.

I.4 Processus de combustion :…….....4.

I .5Types de combustion :…… …….5.

I .6 Enjeux de l'étude de la combustion :……..…...5.

I .7Utilisations industrielles :…….....5.

I .8Modes de combustion élémentaires :…….....6.

I .8.1La combustion pré-mélangée :…….……6.

I .8.2La combustion non pré-mélangée :……...…….....6.

I .8.3La combustion partiellement pré-mélangée :……7.

I .9 La combustion turbulente :…….....8.

I.10 Brève présentation de quelques modèles de combustion turbulente :……. …….9.

I .11 Modèles de combustion turbulente :…… …….....9.

I-11 Réaction chimique :…… ….……..9.

I -11-1 Vitesse de réaction :……...….10.

I-11-2 Classification :……..…11.

Chapitre II: stabilisation des flammes

II. Introduction :…….....13.

II.1 LES FLAMME :…… .……..13.

II. 1 .1 Définition :…… ……..13.

II. 1 .2 Classification des flammes :……13.

II. 1 .3 LES FLAMME LAMINARE :…… ……...14.

a) Flamme laminaire pré mélangée……..14.
b) Flamme laminaire non pré mélangée……...16.

II.2 Stabilité des flammes :……..……...17.

II.2.1 Stabilité de flamme en milieu non pré mélangé :…… ……..17.
II.2.1 .1 Structure d'une flamme de diffusion :…… ……...17.
II.2.1 .2 Stabilisation d'une flamme de diffusion :……..18.
II.2.1 .2.a Auto-inflammation :…….....21.
II.2.1 .2.b Stabilisation par zone de recirculation :……...22.
II.2.1 .2.c Flamme pilote :……....23.

II .2.2.Stabilité de flamme en milieu pré-mélangé :……23.
II. 2.2.1 Structure d'une flamme pré-mélangée :……..23.
II. 2.2.1.a) Epaisseur de flamme laminaire :……..24.
II. 2.2.1.b). Vitesse de flamme :……25.
II.2.2.2 Stabilisation des flammes de pré-mélange :……...28.
II.2.2.3Limites de stabilité……...31.
II .2.3. Flammes partiellement pré-mélangées……31.
II .2.3.2Stabilisation des flammes partiellement pré-mélangées…….....35.
II .2.3.3Flammes triples :…… ……....37.
II .2.3.3Flammes doubles …….....39.

Chapitre III : présentation de code CHEMKIN

III. Introduction :…….....43.

III.1 Historique de chemkin :……...43.

III.2 Définition :…….……44.

III.3 Propriétés disponibles pour une utilisation dans la facilité d'étude Paramètre :……..44.

III.4 Vue d'ensemble du logiciel CHEMKIN-PRO :……...45.

III.4.1 Loi d'Arrhenius :……..……49.

III.4.2 Zone de travail :……..…..49.

III.4.3 Menu et barres d'icônes :……....51.

III.4.4 Arbre / Palette Voir :……....51.

III.4.1 Modèles Tab :……..…..51.

III.5 Les propriétés des éléments principaux :……..…52.

III.6 Présentation de CHEMKIN:……...53.

III.7 Tracées les graphes : la température, La pression ; mole Fraction en fonction de Temps:…….…….60.

Chapitre IV : Simulation et résultats

VI .1 Introduction :…… ……..62.

IV.2 Définition :……...62.

IV.2.1 Condition intaille de reflected-shock :……..62.

IV.2.2 Problème de Project: ……...62.

IV.3.1 Cas de l'oxygène :…….....63.

IV.3.2. Présentation……63.

IV.3.4 Courbes d'évolution du cas de la combustion avec O2 ……..…69.

IV.3.2 cas de l'air:…… …71.

IV.3.2.1 Graphes du cas de la combustion avec de l'air :…….……77.

IV.4Etude Comparative :……..79.

IV.5 Cas 3 : Flamme du brûleur stabilisé (Burner-stabilized Flame) ……81.

IV.5 .1 Introduction …….81.

IV.5 .2 Définition de pré-mixed Flamme :……...81.

IV.5 .3Condition initiale de pré-mixed : ……...82.

IV.5 .4 Présentation :……82.

IV.5.5 Tracée les graphes :……...89.

IV.5 .5.1 Effet de la pression d'entrée « P » : ……..……..…90.

IV.5 .5.2 Effet de la longueur « L » :……..93.

IV.5 .5.3 Effet de la température « T » :……...……..95.

Liste de tableau

Chapitre I		
Tableau	**Titre**	**Page**
Tableau I.1	Avantages et inconvénients principaux des trois modes de combustion	7
Chapitre II		
Tableau III.1	CHEMKIN-PRO Modèles de réacteur Description	46

Liste des figures

Chapitre I		
Figure	**Titre**	**Page**
Figure I.1	Triangle du feu	4
Figure I.2	Réaction chimique (échange d'atomes entre les composés, exemple de la combustion du méthane dans le dioxygène)	10
Figure I.3	Isomérisation du glucose-6-phosphate en fructose-6-phosphate	12

Chapitre II		
Figure	**Titre**	**Page**
Figure II.1	Types de flammes	13
Figure II.2	Différents régimes de flammes	14
Figure II.3	Structure d'une flamme laminaire pré-mélangée	14
Figure II.4	Profile d'une flamme laminaire pré mélangée	15
Figure II.5	Structure d'une flamme laminaire non pré-mélangée.	16
Figure II.6	Structure d'une flamme de diffusion	18
Figure II.7	Schéma d'une flamme de diffusion accrochée, (a) laminaire, (b) turbulente [Demare, 2003]	19
Figure II.8	Stabilisation d'une flamme de diffusion sur la lèvre d'un brûleur	20
Figure II.9	Stabilisation d'une flamme de diffusion suspendue, Formation d'une flamme triple	20
Figure II.10	Stabilisation d'une flamme de diffusion par auto-inflammation	21
Figure II.11	Flamme de diffusion stabilisée en aval d'une zone de recirculation.	22
Figure II.12	Stabilisation d'une flamme de diffusion par flamme pilote	23
Figure II.13	Schéma du principe de la flamme 1D pré-mélangé	24
Figure II.14	Structure d'un front de flamme de pré-mélange laminaire.	25
Figure II.15	représentations des vitesses de l'écoulement de la flamme sur un élément de surface du front de flamme da	26
Figure II.16	Déviation des lignes de courant au travers du front de flamme.	27
Figure II.17	Stabilisation d'une flamme sur un brûleur de type Bunsen.	28
Figure II.18	profil de vitesse de l'écoulement et de vitesse de flamme à la sortie d'un brûleur de type Bunsen.	29
Figure II.19	Représentation qualitative de la stabilité de la flamme sur un brûleur de type Bunsen dans le plan vitesse de sortie de l'écoulement-richesse du pré-mélange.	30
Figure II.20	Structure d'une flamme partiellement pré-mélangée - configuration initiale de diffusion (Chung= Lee, 1991).	34

Figure II.21	Structure d'une flamme partiellement pré-mélangée - configuration initiale de pré-mélange (Locket al. 2005).	34
Figure II.22	Structure d'une flamme triple (Boulanger et al. 2002).	37
Figure II.23	Image de fluorescence du radical CH - extrémité de flamme double (Watson = Lyons, 1999).	39
Figure II.24	Structure de flamme double stabilisée sur un brûleur	40

Chapitre III		
Figure	**Titre**	**Page**
Figure III.1	Zone de travail.	51
Figure III.2	fenêtre de chemkin PRO.	53
Figure III.3	Zone de travail.	54
Figure III.4	fenêtre de diagrame View.	54
Figure III.5	fenêtre de pre-processing chemistry set.	55
Figure III.6	fenêtre de propriété physique.	55
Figure III.7	fenêtre de Rectant Fraction.	56
Figure III.8	fenêtre Run calculation-de Begin.	56
Figure III.9	fenêtre Run calculation-next step.	57
Figure III.10	fenêtre Run calculation- Process Soulution Data.	57
Figure III.11	La Température on fonction de Temps.	58
Figure III.12	pression on fonction de Temps.	58
Figure III.13	Fraction molaire OH on fonction de Temps.	59
Figure III.14	la variation de fraction molaire O et H.	60
Figure III.15	les variations de fraction molaire H2, O2 et CH4.	60

Chapitre IV		
Figure	**Titre**	**Page**
Figure IV.1	Fenêtre de CHEMKIN-PRO.	65
Figure IV.2	Menu de lancement d'un cas de reflected shock.	66
Figure IV.3	Fenêtre de chemistry set.	66
Figure IV.4	Fenêtre de View résulte.	67
Figure IV.5	Fenêtre de propriétés physiques.	67
Figure IV.6	Fenêtre de Réactant species.	68
Figure IV.7	Fenêtre de calcule .	68
Figure IV.8	Fraction molaire O en fonction du Temps**.**	69
Figure IV.9	Fraction molaire H en fonction du Temps.	69
Figure IV.10	la fraction molaire OH en fonction du molaire.	69
Figure IV.11	la variation de la température.	70
Figure IV.12	Fenêtre de chemistry set.	74
Figure IV.13	Fenêtre de View resulte.	75
Figure IV.14	Fenêtre de Réactant species.	75
Figure IV.15	Fenêtre de calcule.	76
Figure IV.16	Fraction molaire O en fonction du Temps.	77
Figure IV.17	Fraction molaire H en fonction du Temps.	77
Figure IV.18	la fraction molaire OH en fonction du temps.	77
Figure IV.19	la variation de la température.	78

Figure IV.20	la fraction molaire NO en fonction du temps.	79
Figure IV.21	variation des fractions molaires de O, H, OH.	80
Figure IV.22	la variation de la température.	80
Figure IV.23	Fenêtre de CHEMKIN-PRO.	84
Figure IV.24	Menu de lancement d'un cas de pré-mixed-burner.	84
Figure IV.25	Fenêtre de chemistry set.	85
Figure IV.26	Fenêtre de View resulte.	86
Figure IV.27	Fenêtre de Reacteur physical properties.	86
Figure IV.28	Fenêtre de Grid properties.	87
Figure IV.29	Fenêtre de Initial Grid.	87
Figure IV.30	Fenêtre de stream properties data.	88
Figure IV.31	Fenêtre de Reactant fraction.	88
Figure IV.32	Fenêtre de calcul.	89
Figure IV.33	variations des fractions molaires	89
Figure IV.34	variation de fraction molaire H.	90
Figure IV.35	variation de fraction molaire OH.	91
Figure IV.36	variation de fraction molaire O.	92
Figure IV.37	variation de la température.	92
Figure IV.38	variation de fraction molaire O.	93
Figure IV.39	variation de fraction molaire H.	94
Figure IV.40	variation de fraction molaire OH.	94
Figure IV.41	variation de la température.	95
Figure IV.42	variation de Fraction molaire O.	96
Figure IV.43	variation de Fraction molaire OH.	96
Figure IV.44	variation de Fraction molaire H.	97
Figure IV.45	variation de la température.	98
Figure IV.46	variation de Fraction molaire OH.	98

Symboles et abréviations

symbole	Signification	unité
d	Coefficient de diffuions thermique	
u	Vitesse axial	**[m.s-1]**
$\mathbf{u_L}$	Vitesse de la flamme laminaire	**[m.s-1]**
$\mathbf{u_{Fuel}}$	La vitesse d'dubitation du fuel	**[m.s-1]**
$\mathbf{u_c}$	Vitesse d'injection de la combustion	**[m.s-1]**
v	Vitesse radial	**[m.s-1]**
$\vec{\mathbf{v}}_\mathbf{p}$	Vitesse de propagation	**[m.s-1]**
$\mathbf{v_{PN}}$	Projection normal de la vitesse de propagation	**[m.s-1]**
$\mathbf{v_{PT}}$	Projection tangentielle de la vitesse de propagation	**[m.s-1]**
$\mathbf{v_g}$	Vitesse écoulement de gaz écoulement	**[m.s-1]**
$\mathbf{v_g}_\circ$	Vitesse d'écoulement en sortie de l'injecteur	**[m.s-1]**
w	Vitesse de propagation du front r référentiel du laboratoire	**[m.s-1]**
$\mathbf{v_P}$	Vitesse d'une particule	**[m.s-1]**
$\vec{\mathbf{n}}$	Vecteur normale au front de flamme	
$\mathbf{S_L}$	Vitesse de flamme laminaire	**[m.s-1]**
$\mathbf{S_T}$	Vitesse de flamme turbulente	**[m.s-1]**
z	Fraction de mélange	
$\mathbf{z_s}$	Fraction de mélange à la stœchiométrie	
$\mathbf{D_i}$	Diamètre de brûleur	**[m]**
D	Diffusivité massique	
dA	Surface	**[m2]**
x	Dissipation scolaire	
H	Hauteur	**[m]**
r	Rayon de flamme	**[m]**
T	Température	**[K]**
E	Energie d'activation d'Arrhenius	**[J.mol-1]**
R	Constante de gaz parfait(R=8.314)	**[JK-1mol-1]**
K	Coefficient de vitesse (constante de vitesse)	
A	Facteur pré-exponentielle	
Cp	Capacité calorifique massique à pression constante	**[J · kg−1 · K-1]**

Lettres grecques

symbole	Signification	unité
α	Angle de la vitesse avec le front de la flamme(gaz frais)	
δ_L	Epaisseur de la flamme laminaire	**[m]**
δ_P	Epaisseur de préchauffage	**[m]**
δ_R	Epaisseur de la réaction	**[m]**
λ	Conductivité thermique	**Watt· m−1· k−1**
ρ	Masse volumique	**[kg/m3].**
ν	Viscosité cinématique	**[m2 /s]**
τ_c	Temps de la réaction chimie	**[s].**
φ	Richesse de mélange	
θ	Demi -angle ou sommet du cône de la flamme	

Nombres sans dimension

symbole	signification
Re	Nombre de Reynolds
β	Nombre de Zeldovitch

Référence

[1] :https://en.wikipedia.org/wiki/combustion.

[2] : https://fr.wikipedia.org/wiki/triagle_des_feu.

[3] : NOUI SAMIRA : étude numérique de la combustion des gaz dans un four de cimenterie. Mémoire de Magistère, université de haje-Lakhdar Batna2014.

[4] :www.forum-pompier.com/dice/termo-503.html.

[5] : Manuscrit thèse-belhi : simulation numérique de l'effet de champ électrique sur la stabilité des flammes de diffusion, docteur de l'insa de rouen 2012.

[6] : Benzerouk Abdelkader : simulation numérique du comportement d'une flamme nom pré-mélange hydrogène/air d'un milieu confié mémoire de Master université de Médéa 2013.

[7] : Guillaume Albouze : simulation aux grandes échelles des écoulements réactifs nom pré mélange thèse doctorat université de Toulouse, France ,2009.

[8] : Boukhelef Mohamed : étude de comportenent de la flamme d'hydrogène dans des canaux en utilisant une Approche CFD Université Dr. Yahia Farès de Médéa2014.

[9] : Mouangue Ruben Martin ; thèse de doctorat : contriution à la modélisation de la combustion turbulente nom pré mélange avec prise en compte de l'autre-allumage P10-2011.

[10] : D. Veynante. Flamme de diffusion laminaire. Techniques de l'ingénieur **BE8320** (1999).

[11] : Corine Lacour , Stabilité de flamme laminaire partiellement pré-mélangées application aux bruleurs domestiques , These de Doctorat, INSA, Rouen, France, 2006.

[12] : Jiesheng Min, Comportement transitionnel et stabilisation de flammes-jets non-premelanges de méthane dans un coflow d'air dilue en CO2 Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen, 2011.

Résumé :

Ce travail présente une étude numérique de la stabilisation des flammes.On étudiera l'écoulement réactif d'un mélange Combustible-Oxygène puis du mélangeCombustible-Air. La combustion est modélisée par les modèles Reflected-Shock et Pré-Mixed Flamme intégrés dans le code de calcul **«** CHEMKIN PRO **».**

Une étude paramétrique a été menée. On a examiné, principalement, l'effet desconditions initiales sur la structure de la flamme ; en occurrence :la temperateure et le temps dans le cas de Reflected Shock etla pression et la distanse de la chambre de combustion dans le cas de Pré-mixed.

Les résultats de simulation obtenus montrent l'évolution de la température et de la fraction molaire des espèces radicaux OH, O, H, NO.

Mots clés : Combustion – stabilisation des flammes– Reflected-Shock –Pré-mixed–Chemkin

Abstract:

This work presents a numerical study of the stabilization of the flames. The flow considered is a rective flow of Fuel-Oxygenmixture and Fuel-Air Mixture.

The Combustion is modeled by the Reflected Shock Modeland Pre-mixed flame Model integred in "CHEMKIN PRO" code.

A parametric study was conducted. We examine, mainly, the effect of initial conditions on the flame structure; in this case: the temperateure and time (in the case of reflected shock) andthe pressure and axial distance (in the case of pre-mixed).

The simulation results obtained show the evolution of temperature and mole fraction of radical species OH, O, H, NO.

Keywords: Combustion - stabilizing flame-reflected shock -pre-mixed-ChemKin code

الملخص:

يهدف هذا العمل على دراسة عددية لتحقيق الاستقرار في لهيب . بحيث يعتبرالتدفق مزيج منغازالأكسجين والهواء قابلة للاحتراق.الاحتراقيحصل عن طريق وضع النحو المبين صدمة واللهب قبل المختلط(الموقدالممزوجة مسبقا) . **و**ذلكباستخداماالبرنامجالعددي"CHEMKIN PRO"

نقوم في هذه الدراسة بفحص تأثير الشروط الابتدائية على بنية اللهب حيث نغير كل من درجة الحرارة والزمن في حالة صدمة وكذلك الضغط والمسافة في حالة اللهب قبل المختلط

نتائج المحكات اللتي تم الحصول عليها تكون على شكل تغيرات لكل من درجة الحرارة والكسر المولي للأنواع المحاكاة التالية N: OH, H , O.

كلمات البحث :الاحتراق -استقرار اللهب–انعكاس صدمة-ChemKin.

Résumé

Introduction générale

Les Phénomènes de combustion se composent de nombreux processus physiques et chimiques qui présentent un large spectre d'échelles de longueurs et de temps à déterminer. Une description mathématique de la combustion n'est toujours triviale, bien que certaines solutions analytiques des situations simples des flammes laminaires existent. Ces modèles analytiques sont généralement limités à des problèmes de zéro ou une dimension de l'espace.

La combustion est aujourd'hui un des principaux moyens de conversion de l'énergie. Elle est utilisée dans de nombreux systèmes pratiques aussi bien pour produire de l'énergie thermique (chaudières ou fours domestiques et industriels) ou de l'électricité (centrales thermiques), que pour le transport (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs fusée, ...) ou encore la destruction de déchets (incinérateurs). La combustion peut être caractérisée comme une réaction irréversible fortement exothermique entre un combustible et un comburant.

Les flammes se manifestent dans notre quotidien par le biais d'utilisations aussi diverses qu'une bougie ou un moteur à combustion interne. Cette source d'énergie dont l'homme moderne ne saurait plus se passer est inutilisable si elle n'est pas maîtrisée. Depuis les prémices de la recherche en combustion jusqu'aux plus récents développements de modèles et de techniques de mesures, la problématique de stabilité de flamme est largement abordée. Dans le contexte actuel, l'amélioration des performances ainsi qu'un meilleur contrôle de la consommation de combustible nécessitent une bonne compréhension des phénomènes physiques fondamentaux qui pilotent la stabilisation des flammes. La maîtrise des mécanismes de stabilisation de flamme s'avère en effet primordiale dans des domaines de la combustion très divers.

La stabilisation des flammes est un sujet largement abordé dans les configurations de flammes partiellement pré-mélangées. Ce régime particulier de combustion est établi lorsque les deux régimes de combustion "classiques", pré-mélangé et diffusion, coexistent. Il s'avère utile, dans de nombreuses situations, de décrire la combustion comme de type partiellement pré-mélangée. En effet, ces flammes peuvent se rencontrer dans une configuration de flamme de diffusion suspendue pour laquelle une zone de mélange est favorisée à la base de la flamme. Les flammes partiellement pré-mélangée s ont également été étudiées à la sortie d'un écoulement de pré-mélange dont la richesse est supérieure à la stœchiométrie. Ce régime de combustion recouvre une large gamme de structure de flamme. La flamme partiellement pré-

mélangée a pu être observée sous la forme d'une flamme triple avec une branche de pré-mélange riche et une branche pauvre complétées par une queue de diffusion. Dans certaines conditions, la flamme peut prendre une forme "ailée" composée d'un noyau de pré-mélange très réactif suivi d'une queue de diffusion. Des flammes "doubles" ont pu également être observées lors de la disparition de la branche de pré-mélange riche ou pauvre.

L'objectif principal du présent travail est la simulation numérique de stabilisation de la flamme d'une brûlure Méthane-Air, hydrogène-O2, et hydrogène-Airen utilisant le**code CHEMKIN**. Lors de cette simulation, on a utilisé :

- **Modèle Reflected-chok.**
- **Modèle Pré_mixed-burner.**

Pour ce faire, on a adopté le plan de travail suivant : Nous discuterons d'abord les propriétés et procédures de combustion (chapitre 1), la stabilité de flamme avec de hydrogène (combustible) (chapitre 2). Une Présentation générale du code CHEMKIN (chapitre 3). Finalement, nous décrirons et discuterons les principaux résultats des simulations dans le chapitre 4. En fin, on va donner quelques remarques de conclusion.

I.1 INTRODUCTION

Depuis son existence sur la terre, l'homme n'a cessé d'utiliser la combustion. Il utilisa le feu pour se nourrir, se réchauffer et pour se défendre. Aujourd'hui, la vie humaine est basée sur la combustion comme sur l'air et l'eau. Notre progrès dépend de plus en plus sur la combustion des hydrocarbures qui dégagent des émissions nocives à notre environnement. Les lois qui gèrent ces émissions sont très restrictives. Plusieurs travaux visent à minimiser ces émissions en introduisant des techniques, telles que la combustion pauvre, la combustion des carburants d'origine renouvelable et qui ne contient pas de carbone.

I.2Définition de la combustion

La combustion est une réaction exothermique d'oxydoréduction. Lorsque la combustion est vive, elle se traduit par une flamme dans le cas d'une combustion ou par une explosion, si le front de flamme dépasse la vitesse du son.

On appelle aussi combustion nucléaire la transformation d'atomes provoquée par le fonctionnement d'un réacteur nucléaire, bien qu'il s'agisse de réactions nucléaires et non pas d'oxydoréduction [1].

I .3Le triangle de feu

I-3-1Définition

Le triangle du feu est un modèle simple pour comprendre les éléments nécessaires pour la plupart des incendies. La réaction chimique de la combustion ne peut se produire que si l'on réunit trois éléments : un combustible, un comburant, une énergie d'activation en quantités suffisantes. C'est pourquoi on parle du « triangle du feu » [2].



Figure (I.1) : Triangle du feu.

I.4 Processus de combustion

La combustion désigne une réaction chimique évoluant rapidement, accompagnée D'émission lumineuse et d'un important dégagement de chaleur selon le schéma global suivant :

Combustible + Comburant ⟶ Produit de combustion + Chaleur

Plus précisément, cette réaction :

- Induit un fort dégagement de chaleur, qui a lieu dans une zone très mince (les flammes les Plus courantes ont des épaisseurs δ_L typiques de l'ordre de 0.1 à 1 mm) conduisant à des gradients thermiques très élevés.

- Correspond un temps de réaction fortement non linéaire (loi d'Arrhenius).

Différents mécanismes de couplage interviennent en combustion. Les schémas Cinétiques de la réaction chimique doivent être décrits pour déterminer le taux de Consommation du combustible, la formation de produits de combustion et des espèces polluantes et prédire l'allumage, la stabilisation et l'extinction des flammes. Les transferts de masses, par diffusion moléculaire ou transport convectif, des différentes espèces chimiques sont aussi des éléments importants des processus de combustion. Le dégagement d'énergie du à la réaction chimique induit des transferts thermiques intenses par conduction, convection et /ou rayonnement [3].

I .5Types de combustion

- **Combustion vive** : Une combustion vive est une combustion qui libère beaucoup d'énergie sous forme de chaleur et de lumière en peu de temps.
- **Combustion spontanée** : Une combustion spontanée est une combustion vive qui atteint sa température d'ignition sans agent extérieur.
- **Combustion lente** : Une combustion lente est une combustion qui se produit sur une longue période de temps. L'énergie est tranquillement libérée dans l'environnement [4].

I .6Enjeux de l'étude de la combustion

La combustion est un phénomène extrêmement répandu dans la nature et l'industrie. Depuis son existence sur Terre, l'homme n'a cessé d'utiliser la combustion. Il utilisa le feu pour se nourrir, se réchauffer et pour se défendre. Aujourd'hui, la vie industrielle est basée en grande partie sur la combustion et les flammes. Mais avant de présenter ses applications, il est important de donner la signification de la combustion. Une question qui a été continuellement débattue sans une évidente conclusion. Une définition courante la présente comme une réaction chimique exothermique, qui se matérialise par des flammes, entre l'oxygène de l'air et certaines substances (gaz, liquide ou solide) dites combustibles.

La combustion ne peut se produire que lorsque l'on réunit trois éléments : un combustible, un comburant (oxygène) et une énergie d'activation (certaine température). On appelle ceci le triangle du feu.

La combustion et les flammes ont longtemps posé des problèmes de compréhension et de maîtrise. Ces problèmes viennent du fait que plusieurs aspects physiques et chimiques interviennent simultanément et d'une façon couplée. Pour une compréhension plus fine de ces aspects, on pourra se référer à certains livres de référence.

I .7- Utilisations industrielles

À combustion reste encore aujourd'hui le principal moyen de conversion de l'énergie. Le nombre élevé des applications l'atteste. Les études les plus récentes font état de la poursuite d'un recours majoritaire à la combustion au moins jusqu'à l'horizon 2020, notamment dans les secteurs d'automobile et du transport aérien.

L'industrie utilise la combustion et les flammes de nombreuses et différentes manières **:**
Les moteurs : Ils représentent la plus grande catégorie de dispositifs de combustion. Ils sont généralement utilisés dans le secteur de transport pour propulser les divers véhicules : avions, fusées, bateau et automobiles grâce à l'énergie thermique que la combustion dégage. Différents types de moteurs existent ; les exemples les plus courants sont les moteurs à allumage commandé, les moteurs Diesel, les turboréacteurs et le moteur-fusée.
Les brûleurs : Ils sont utilisés dans la plupart des applications de la combustion destinées produire de l'énergie sous forme de chaleur ou d'électricité. Cette énergie est essentiellement générée dans des installations comme les turbines à gaz, les centrales thermiques, les fours ou encore les chaudières. Les brûleurs peuvent également avoir comme rôle de détruire (incinération des déchets), transformer (sidérurgie, métallurgie, ...) ou fabriquer des produits (verre, ciment, papier, nylon, ...). On peut distinguer les brûleurs à gaz, les brûleurs à fuel-oil (liquide) et les brûleurs qui utilisent comme combustible le charbon (solide).
Les incendies et les explosions : Ils constituent, enfin, la dernière catégorie de situations industrielles ou naturelles dans laquelle la combustion joue un rôle prépondérant. Ces phénomènes peuvent être mis en relation directe avec les applications de la combustion citées précédemment. La compréhension de tels événements peut alors servir Pour les contrôler entrevoyant leur déroulement possible et donc estimer les risques associés.
Pour une description plus détaillée des utilisations de la combustion dans l'activité humaine, le lecteur pourra se référer à l'ouvrage [5].

I .8- Modes de combustion élémentaires :

I .8.1- La combustion pré-mélangée :

C'est un mode de combustion où carburant et oxydant sont pré mélangés avant d'atteindre le front de flamme. Ce mode est souvent utilisé en régime pauvre, permettant ainsi d'augmenter le rendement du système de combustion et de réduire la production d'oxydes d'azote, polluant très nocif dont on veut limiter la production. En contrepartie, les flammes obtenues sont souvent difficiles à maîtriser, nécessitant l'utilisation de dispositifs complexes d'accrochage de flamme.

I .8.2- La combustion non pré-mélangée :

C'est est un mode de combustion où carburant et oxydant sont injectés par deux courants différents. Le front de flamme se positionne à la rencontre des deux lignes d'introduction des courants. Ce mode de combustion, qui est donc plus facile à maîtriser, al 'inconvénient de

former plus de polluants, du fait des hautes températures atteintes dans le front de flamme. Il en résulte que le développement des flammes de diffusion est commandé essentiellement par des facteurs aérodynamiques et l'aspect chimique lié à la nature des réactifs reste secondaire [6].

I .8.3La combustion partiellement pré-mélangée :

C'est un mode de combustion intermédiaire retrouvé fréquemment dans les applications industrielles. Pour des raisons de sécurité, l'oxydant et le carburant sont stockés séparément (l'oxydant est par ailleurs bien souvent pris dans l'environnement extérieur et n'est pas stocké par le système de combustion). L'oxydant et le carburant sont donc injectés par deux courants différents, en amont du front de flamme, et sont supposés se mélanger avant d'atteindre le front de flamme. Mais il arrive très fréquemment que le mélange ne soit pas parfait et que des hétérogénéités de mélange atteignent le front de flamme. Dans un autre sens, il est envisageable que les deux courants d'un système non pré-mélangé se mélangent avant d'atteindre le front de flamme. Ainsi le mode de combustion n'est plus non pré-mélangé mais partiellement pré-mélangé. [7]

Mode de combustion	Avantages	Inconvénients
Pré-mélangé	Peu polluant (en régime pauvre)	Instabilité de combustion, stockage du mélange
Non pré-mélangé	Stabilité de la flamme, stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Production d'oxydes d'azote
Partiellement pré- mélangé	Peu polluant (en régime pauvre), stockage du carburant en dehors des limites de flammabilité	Instabilité de combustion, hétérogénies de mélange

Tableau I.1:Avantages et inconvénients principaux des trois modes de combustions

I .9La combustion turbulente

Dans un foyer, l'écoulement est turbulent c'est à dire que les vitesses des gaz, mesurées en un point fluctue continuellement de façon apparemment aléatoire, même en régime parfaitement établi ; ceci est vrai pour la température et toute autre caractéristique du milieu. Cette turbulence est due à une forte vitesse de l'écoulement entrant. Elle s'est développée dans le canal amont à cause des gradients de vitesse aux parois et à partir d'obstacle tels que les injecteurs. L'interaction entre un processus chimique de combustion et la "turbulence" joue un rôle très important dans de nombreux systèmes de combustion, pour la propulsion ou la production d'énergie, comme par exemple les chambres de combustion des turboréacteurs, des chaudières ou des turbines à gaz. L'étude de ces écoulements turbulents de gaz réactifs a conduit à l'introduction de différentes grandeurs caractéristiques de ces phénomènes physiques. Ces quantités sont issues de la mécanique des fluides, de la thermodynamique et de la chimie [8].

I.10 Brève présentation de quelques modèles de combustion turbulente

En turbulence classique, les équations pour les divers moments des variables dépendantes sont dérivées à partir des équations de bilan. On montre alors que ces équations ne peuvent être 'fermées' à aucun niveau et que des hypothèses de fermeture, souvent empiriques, sont nécessaires. Ces hypothèses proposent de relier les moments d'ordre supérieur aux moments d'ordre inférieur par des relations universelles.

Cette démarche constitue aujourd'hui l'essentiel des efforts de modélisation en Turbulence classique, c'est-à-dire dans les écoulements non- réactifs à masse volumique constante ou variable. Cette tâche, qui n'est déjà pas simple en turbulence pure, est autrement plus compliquée lorsque les échelles temporelles et spatiales dues à la combustion interagissent avec celles de la turbulence. Le problème majeur est celui introduit par le non linéarité du taux moyen de réaction, qui ne peut être exprimé en termes de quelques moments, par exemple, d'une variable de progrès de la réaction chimique [8].

I .11 Modèles de combustion turbulente

II s'agit maintenant de trouver des modèles pour exprimer les taux de réaction moyennes fonction des variables connues, c'est-à-dire des valeurs moyennes elles-mêmes, et probablement aussi en fonction des caractéristiques de la turbulence, puisque celle-ci doit jouer un rôle.

Pour la modélisation des écoulements réactifs, "Fluent" propose quatre modèles :

- Le modèle du taux de réaction généralisé (generalized finite-rate model)
- Le modèle PDF (conserved scalar PDF model)
- Le modèle de la flamme lette (Laminar flamelet model)
- Le modèle de combustion pré mélangée. (Zimont model)[9].

I-12Réaction chimique

Une **réaction chimique** est une transformation de la matière au cours de laquelle les espèces chimiques (atomiques, ioniques ou moléculaires) qui constituent la matière sont modifiées : les espèces qui sont consommées sont appelées réactifs. Les espèces formées au cours de la réaction sont appelées produits de réaction. Depuis les travaux de Lavoisier(1777), les scientifiques savent que la réaction chimique se fait sans variation mesurable de la masse : « Rien ne se perd, rien ne se crée, tout se transforme » qui traduit la conservation de la masse.

Les réactions chimiques provoquent un changement de la nature chimique de la matière, sont donc exclues les transformations purement physiques, comme les changements d'état (fusion, solidification, évaporation, ébullition, etc.), l'usure et l'érosion, et la rupture. Une réaction peut dégager de l'énergie (en général sous forme de chaleur, mais aussi de la lumière), elle est alors une réaction exothermique. Elle peut nécessiter un apport d'énergie, sous forme de chaleur (donc « produire du froid ») ou de lumière, elle est alors une réaction endothermique. D'une manière générale, une réaction ne peut avoir lieu que si certaines conditions sont réunies (présence de tous les réactifs, conditions de température, de pression, de lumière). Certaines réactions nécessitent ou sont facilitées par la présence d'une substance chimique appelée catalyseur. Classiquement, les réactions chimiques impliquent des changements qui concernent le mouvement des électrons, la formation et la rupture des liaisons chimiques. Cependant, le concept général d'une réaction chimique, en particulier la notion d'équation chimique, est aussi applicable aux transformations élémentaires des particules et des réactions nucléaires. En chimie organique, diverses réactions chimiques sont combinées dans la synthèse chimique afin d'obtenir le produit désiré. En biochimie, des séries de réactions chimiques catalysées par des enzymes forment les voies métaboliques, par lesquelles des synthèses et les décompositions d'habitude impossibles sont exécutées dans une cellule.

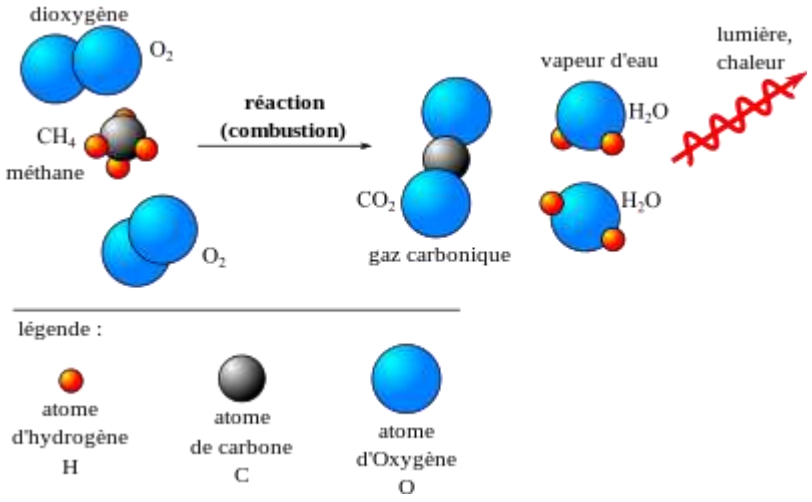


Figure (I.2) : Réaction chimique (échange d'atomes entre les composés, exemple de la combustion du méthane dans le dioxygène).

I -12-1Vitesse de réaction

L'étude de l'énergie du système (thermochimie) permet de savoir si une réaction peut se produire ou non, quelle énergie initiale il faut fournir pour franchir la barrière. Mais il y a un autre paramètre important : la vitesse de réaction.

La vitesse de réaction est la mesure de la modification avec le temps des concentrations ou/et pressions des substances engagées dans cette réaction. L'analyse des vitesses de réaction est importante pour beaucoup d'applications comme l'ingénierie chimique ou l'étude des équilibres chimiques.

La vitesse de réaction dépend de :

- la concentration des réactifs : une plus grande concentration augmente la possibilité de collision entre les molécules et ainsi augmente la vitesse de réaction ;
- la surface disponible pour le contact entre les molécules spécialement du solide dans les systèmes hétérogènes. Une plus grande surface produit une plus grande vitesse de réaction ;
- la pression, qui en augmentant, diminue le volume et donc la distance entre les molécules. Cela augmente la fréquence des collisions des molécules ;
- l'énergie d'activation qui est définie comme la quantité d'énergie nécessaire pour que la réaction débute et s'entretienne spontanément ;
- la température qui en s'élevant active la réaction augmentant l'énergie des molécules et créant plus de collisions par unité de temps ;

- l'absence ou la présence d'un catalyseur qui modifie le mécanisme de la réaction qui, à son tour, augmente la vitesse de la réaction abaissant l'énergie d'activation nécessaire. Un catalyseur n'est pas détruit durant la réaction ;
- pour certaines réactions, la présence de radiations électromagnétiques, spécialement les radiations ultraviolettes, sont nécessaires pour briser des liaisons pour commencer la réaction.

Notons que certaines réactions ne dépendent pas de la concentration des réactifs.

I-12-2 Classification

Il existe une très grande variété de réactions chimiques, mais on peut identifier des« familles » de réactions. Quelques-unes des principales familles sont présentées ci-après, mais cette liste n'est pas exhaustive, et une réaction chimique peut appartenir simultanément à plusieurs de ces familles.

réaction acido-basique, :qui implique un transfert de proton H^+ depuis un acide (qui cède H^+) vers une base (qui capte H^+)

$$NH_4^+{}_{(aq)} + HO^-{}_{(aq)} \rightarrow NH_{3(g)} + H_2O_{(l)}$$

réaction d'oxydoréduction :au cours de laquelle on observe le transfert d'un ou plusieurs électrons depuis un réducteur vers un oxydant :

$$Fe_{(s)} + Cu^{2+}{}_{(aq)} \rightarrow Fe^{2+}{}_{(aq)} + Cu_{(s)}$$

combustion : cas particulier de réaction d'oxydoréduction au cours de laquelle un combustible réagit avec un comburant(généralement le dioxygène) avec un important dégagement de chaleur (réaction fortement exothermique).

$CH_4 + 2\ O_2 \rightarrow CO_2 + 2\ H_2O$ (combustion complète du méthane)

$H_2 + F_2 \rightarrow 2HF$ (combustion explosive du dihydrogène dans le difluor)

réaction organique : impliquant des composés organiques (molécule possédant au moins un atome de carbone (C) lié à un atome d'hydrogène (H)) ; les réactions organiques peuvent être classées par mécanisme (réaction d'addition, de substitution, d'élimination, d'oxydoréduction, de réarrangement…) ou par groupe fonctionnel (réactions des alcools, des acides, des cétones…)

Synthèse totale d'un composé chimique à partir de corps simples :

$$N_2 + 3\ H_2 \rightarrow 2\ NH_3$$

décomposition chimique dans laquelle un composé est scindé en espèces plus simples : les décompositions peuvent être classées en fonction de la nature du phénomène qui les provoque : électrolyse, thermolyse, pyrolyse, radiolyse…

$$2\ H_2O \rightarrow 2\ H_2 + O_2$$

Isomérisation : dans laquelle un composé chimique subit une modification structurale sans modification de sa formule brute réaction radicalaire, dans laquelle au moins un des intermédiaires réactionnels est un radical.



Glc-6-P Fru-6-P

Figure(I.3): Isomérisation du glucose-6-phosphate en fructose-6-phosphate

II.1Introduction :

Dans ce chapitre une étude de stabilisation de flamme à l'aide de brûleur et défini le problème.

II.1 LES FLAMME :

II. 1 .1 Définition :

Une flamme est une réaction de combustion vive se produisant dans une zone d'épaisseur faible, elle produit de la chaleur et émet en général de la lumière. Elle est à l'origine de la production du feu.

II. 1 .2 Les type des flammes :

Selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs dans la zone de flamme deux situations généralement rencontrées sont identifiées

Flammes pré mélangées : Les réactifs sont mélangés avant la zone de réaction. **Flammes non-pré mélangées** ou **flammes de diffusion** : Les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme, Ils sont alors essentiellement entraînés l'un vers l'autre par diffusion molécule.

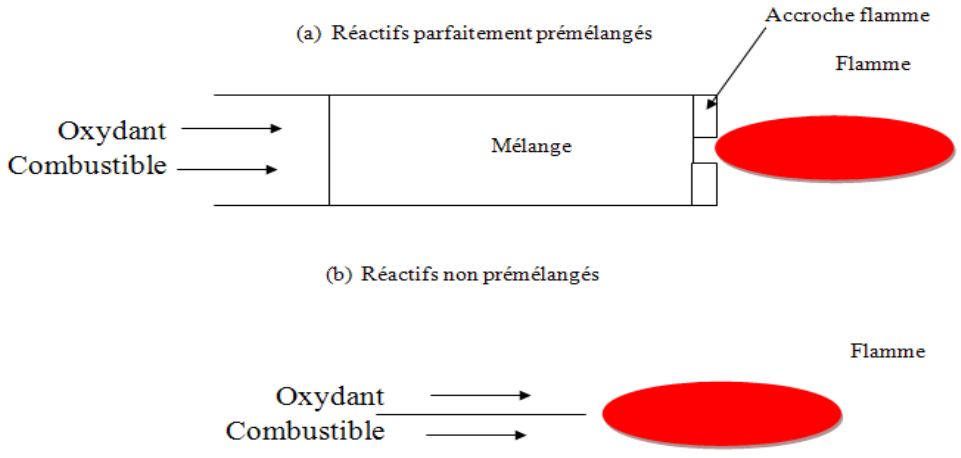


Figure (II. 1) : Types de flammes[5]

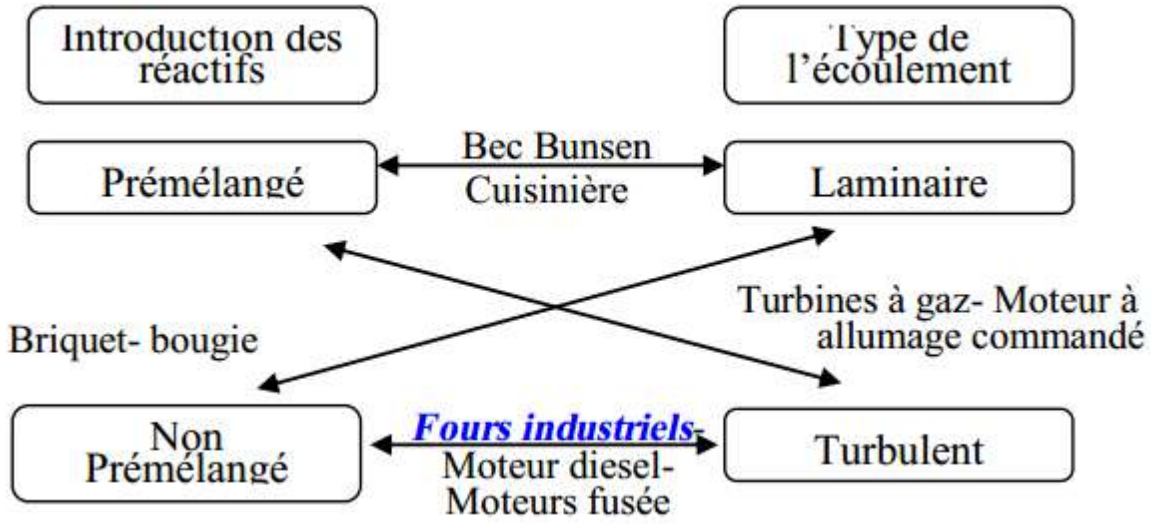


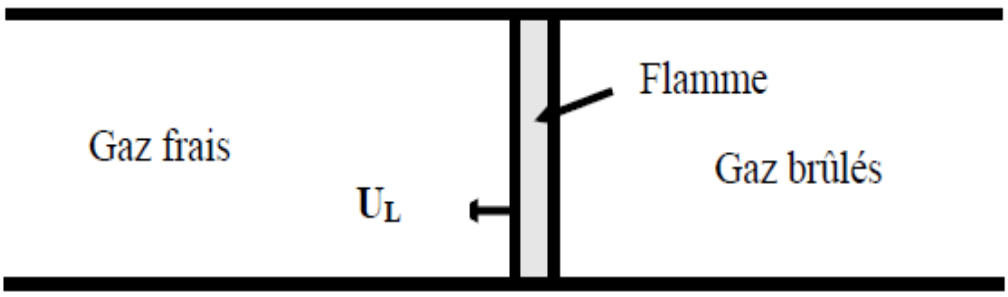
Figure (II. 2):Différents régimes de flammes [5]

II. 1 .3 LES FLAMME LAMINARE :

a) Flamme laminaire pré mélangée

Le combustible et le comburant sont mélangés à l'avance, la propagation de la flamme est le résultat d'une opération composée de deux phénomènes :

- Un préchauffage qui se fait sur une épaisseur δ_p où les réactions chimiques sont inexistantes et où les phénomènes convectifs et diffusion de masse et de chaleur sont -prépondérants.



Figure(II.3) : Structure d'une flamme laminaire pré-mélangée

Arrivant à un certain niveau de température, les gaz réagissent en dégageant de la chaleur, c'est la zone de réaction qui se déroule sur une épaisseur δ *r*. Cet échauffement se fait sur une épaisseur $\delta_L$qu'on appelle épaisseur de la flamme laminaire et qui peut être assimilée à la distance parcourue par la chaleur libérée par réaction pendant le temps τc que dure cette réaction. Ainsi, en faisant intervenir le coefficient de diffusion thermique *d*.

L'épaisseur de la flamme s'exprime sous la forme :

$$\delta_L \sim (d\tau_c)^{1/2} \qquad \text{(II.1)}$$

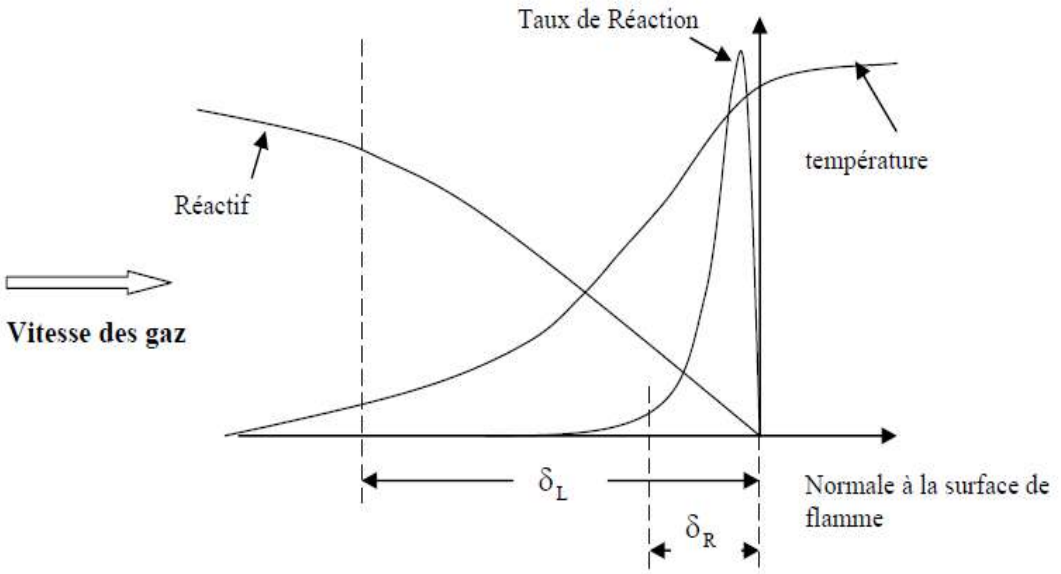


Figure (II.4): Profile d'une flamme laminaire pré mélangée [10]

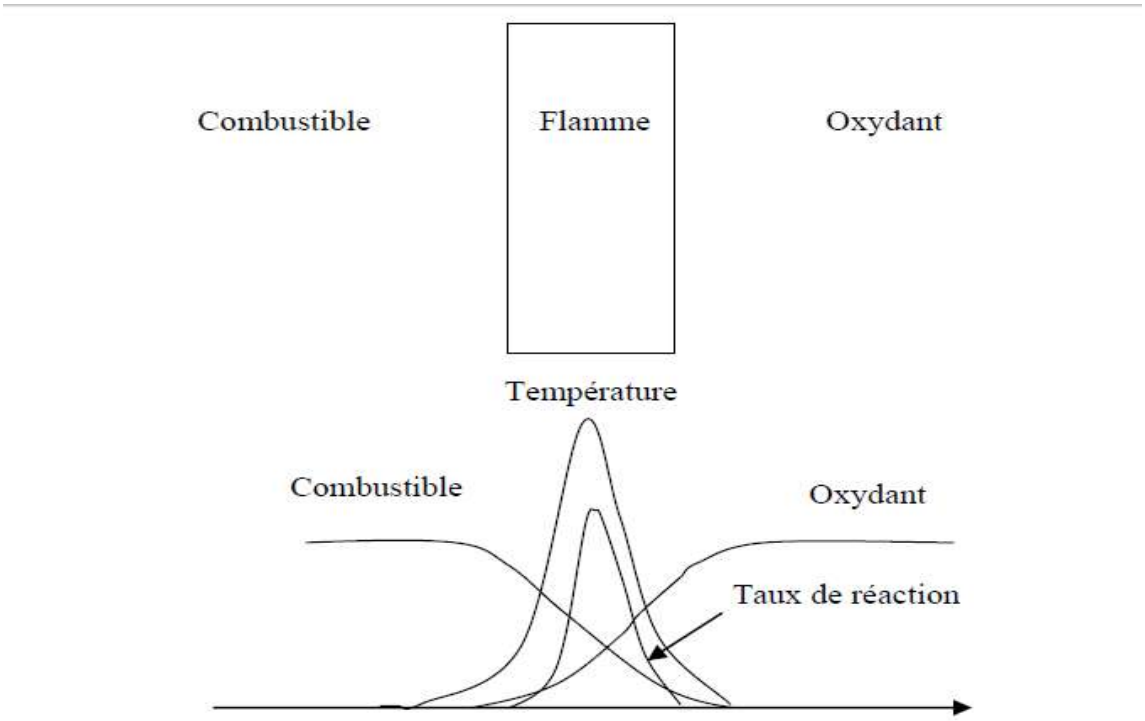
Ces zones se déplacent dans le milieu à une vitesse de propagation perpendiculaire au front de flamme que l'on appelle vitesse de flamme laminaire et que l'on note u_L. Cette vitesse dépend de différents paramètres (nature des réactifs, richesse des mélanges et température des gaz frais) est de l'ordre de 0.1 à 1 m/s.

Le raisonnement précédent nous montre que le front de flamme progresse de δ_L pendant le temps τ_c, u_L peut être définie par la relation :

$$u_L \sim \frac{\delta L}{\tau_c} \sim \left(\frac{d}{\tau_c}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad \text{II.2}$$

b) Flamme laminaire non pré mélangée

La caractéristique principale dite de diffusion qui consiste à présenter une zone de réaction séparant les réactifs, combustible et oxydant. Les profils des fractions massiques et de température sont présentés sur la figure II.5



Figure(II.5): Structure d'une flamme laminaire non pré-mélangée.[10]

Comme les flammes de pré mélange, les flammes de diffusion se développent grâce au concours des phénomènes de réaction ainsi que des phénomènes de diffusion de chaleur et de masse qui se produisent de part et d'autre de la zone réactive. Les phénomènes de convection jouent cependant un rôle plus important en amenant les réactifs et en important les produits de façon plus efficace que la seule diffusion. Pour que la flamme reste laminaire, il faut que les vitesses d'écoulement ne soient pas trop grandes.[10]

II.2 Stabilité des flammes

Pour diminuer les polluants nocifs et les imbrûlés issus de la combustion, on utilise un excédent d'air. Dans ce régime de combustion dit pauvre, on consomme théoriquement tout le combustible, ce qui donne une combustion complète et moins d'imbrûlés. Ce mode de combustion favorise cependant l'apparition des instabilités, par exemple : « le décrochage »,

« Le soufflage » et même « l'extinction » de la flamme.

« En pratique, l'initiation des flammes fait appel à un apport d'énergie extérieur qui provient, par exemple, d'une petite flamme annexe (allumette) ou de l'étincelle issue d'une bougie d'allumage. Mais cet apport n'intervient en général que pendant un temps limité. Ensuite, la flamme doit rester stable sans source extérieure d'énergie, sous peine de s'éteindre [11] ». Une flamme instable ou qui s'éteint en plein processus non seulement ne remplit pas sa mission, mais peut conduire à de grave problèmes de sécurité (explosions et incendies) si les écoulements de gaz ne sont pas arrêtés. L'analyse et l'identification des mécanismes responsables de stabilisation des flammes sont donc nécessaires.
On entend par flamme stable la présence d'une zone de réaction plus ou moins fixe dans l'espace en dépit de petites perturbations de l'écoulement alimentant la combustion. Il s'agit d'un phénomène complexe qui dépend de la dynamique de l'écoulement et de la qualité du mélange des réactifs. Les scénarios régissant la stabilisation des flammes ne sont pas encore bien identifiés à ce jour. Les principaux mécanismes de stabilisation des flammes suggérés, dans les différents régimes de combustion : pré mélangé, de diffusion et partiellement pré mélangé, vont maintenant être brièvement décrits.

II.2.1Stabilité de flamme en milieu non pré mélangé :

De manière générale, pour former une flamme de diffusion, les réactifs sont introduits séparément de part et d'autre de la flamme.

II.2.1 .1 Structure d'une flamme de diffusion

La configuration la plus classique d'une flamme de diffusion est celle où seul le combustible est issu d'un injecteur, le comburant nécessaire à la réaction est alors fourni par l'air ambiant.

La réaction ne peut avoir lieu qu'à l'interface séparant le combustible et le comburant. Les profils de fraction massique sont représentés schématiquement sur la figure II.6. Le taux

de réaction des flammes de diffusion est principalement contrôlé par la diffusion puisqu'elle contrôle l'apport des réactifs dans la flamme. La structure des flammes de diffusion est souvent décrite grâce au rapport des temps de diffusion et de réaction chimique par rapport au temps de convection de l'écoulement. Ces flammes n'ont pas la propriété de se propager puisqu'elles ne peuvent exister que dans la zone où les réactifs coexistent en proportion stœchiométrique.

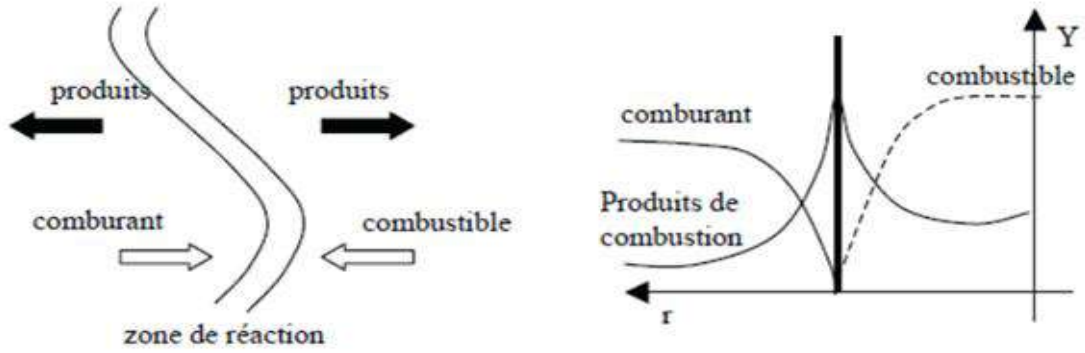


Figure (II.6) : Structure d'une flamme de diffusion [12]

La flamme de diffusion est composée de différentes zones (figure II.7) : une zone centrale qui n'est composée que de combustible, une zone de réaction et la zone contenant les gaz chauds, produits de la combustion. En réalité, la réaction ne se produit pas uniquement le long de la ligne stœchiométrique mais dans la zone d'inflammabilité de part et d'autre de cette ligne. La combustion dans cette zone est alors incomplète et la flamme de diffusion produit des suies issues des molécules de carbone imbrûlées. Les flammes non pré mélangées sont caractérisées par un panache jaune dû au rayonnement des suies.[12]

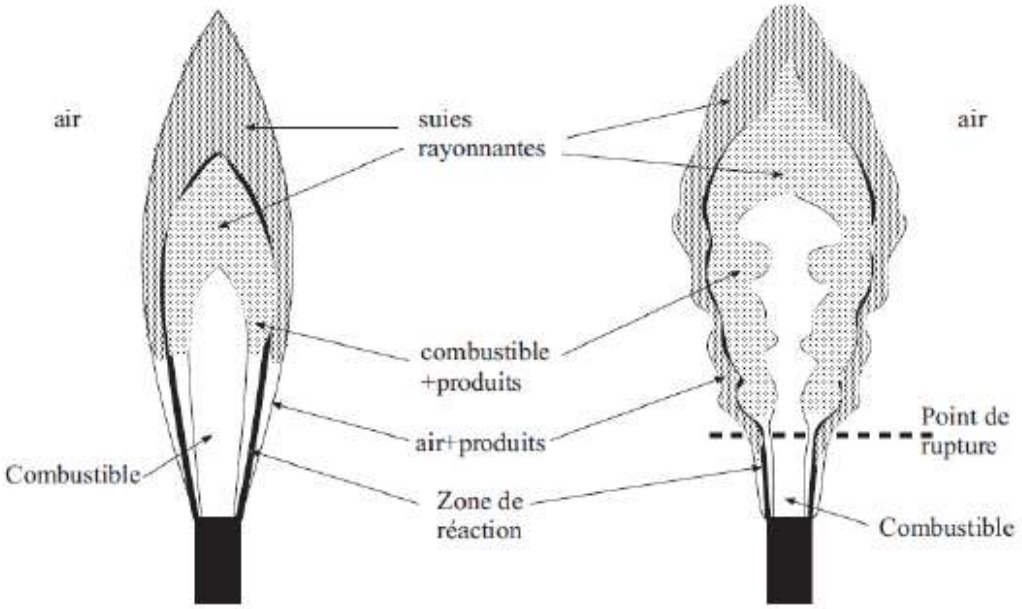


Figure (II.7):Schéma d'une flamme de diffusion accrochée, (a) laminaire, (b) turbulente [Demare, 2003][12]

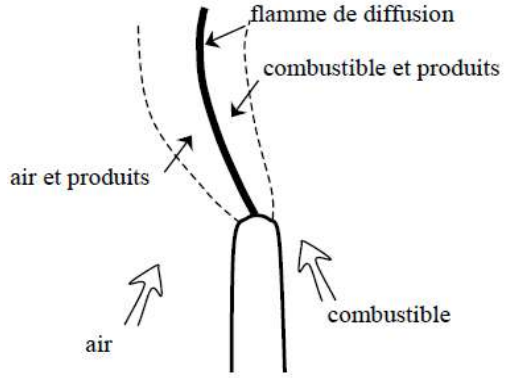
La morphologie du front est caractérisée par le point de rupture (en anglais : break point) qui marque la transition entre les comportements laminaire et turbulent de la flamme. La hauteur du point de rupture s'abaisse de l'extrémité de la flamme vers le brûleur au fur et à mesure que le nombre de *Reynolds*, $R_e$du jet de combustible augmente. On d´définit R_e à partir des propriétés du jet en absence de flamme par $\boldsymbol{R_e = U_{fuel}\, D_i/\nu_{fuel}}$, avec U_{fuel} vitesse d´débitante du fuel, ν_{fuel} sa viscosité cinématique et *Di* diamètre du brûleur. Le comportement laminaire de la flamme peut perdurer au-delà d'une valeur du nombre de *Reynolds* de jet turbulent. En effet, localement, au voisinage de la flamme, on a une laminarisation du jet du fait du chauffage de l'´ecoulement par le d´engagement de chaleur qui augmente la viscosité cinématique [Lewis and Elbe, 1987; Kim and Shin, 1994]. Un nombre de *Reynolds* effectif devient alors plus approprié´e pour d´écrire la transition d'une flamme laminaire à une flamme turbulente. [13]

II.2.1 .2 Stabilisation d'une flamme de diffusion :

Une flamme de diffusion se stabilise aux lèvres du brûleur (figure II.8), si le brûleur est suffisamment bien profilé pour éviter la présence d'une zone de recirculation derrière les lèvres. Lors de la rencontre des jets de comburant et de combustible, une zone de mélange se crée et les réactifs diffusent plus ou moins l'un dans l'autre. Au milieu de la zone de mélange,

il existe une ligne le long de laquelle la proportion de comburant et de combustible correspond à la stœchiométrie et permet la réaction.

Dans certaines conditions de l'écoulement, il est possible d'obtenir une flamme qui se stabilise au dessus des lèvres du brûleur (figure-II.9). La flamme est alors dite "suspendue".



Figure(II.8): Stabilisation d'une flamme de diffusion sur la lèvre d'un brûleur.

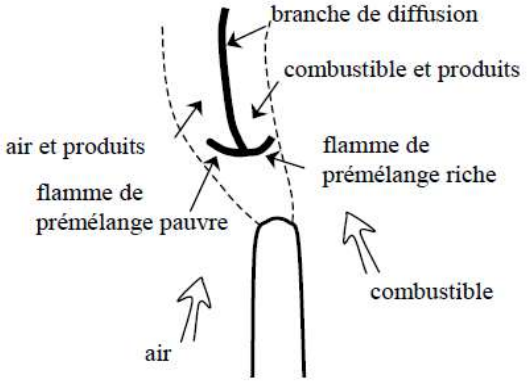


Figure (II.9): Stabilisation d'une flamme de diffusion, Suspendue, Formation d'une flamme triple.

Le comportement des flammes turbulentes suspendues dépend essentiellement de la vitesse du jet. L'évolution de la hauteur moyenne est quasi-linéaire en fonction de la vitesse de sortie des gaz, quelle que soit la nature du gaz (Kalghatgi, 1984). A partir d'une flamme de diffusion accrochée au brûleur, lorsque la vitesse d'éjection du combustible atteint une valeur critique ($U_o > U_c$) la flamme se décolle naturellement du brûleur. Dans le cas d'une flamme initialement suspendue, il faudra diminuer la vitesse à une valeur U_c' inférieure à U_c pour accrocher la flamme. C'est le phénomène d'hystérésis. La transition de l'état accroché à l'état décollé a été décrite selon plusieurs mécanismes de décollage (Takahashi et al, 1990). Le premier mécanisme de décollement correspond à une rupture d'équilibre entre le jet d'air entraîné et la propagation de la flamme près des lèvres du brûleur. Un autre mécanisme d'instabilité est décrit comme une extinction partielle de la flamme qui peut alors soit se décoller directement, soit se scinder en deux parties. Dans ce dernier cas, la portion de flamme restant accrochée au brûleur s'éteint rapidement et une flamme suspendue est observée.

Une fois la flamme décollée et stabilisée au-dessus de l'injecteur, son aspect change de façon radicale. En effet, elle change notamment de couleur, elle devient essentiellement bleue en raison de l'émission de chimiluminescence des radicaux CH*. Le mélange entre le combustible et l'oxydant est rendu plus efficace grâce aux fortes vitesses qui règnent dans le jet, et la production de suies tend à décroître. Cette configuration particulière de flamme

suspendue pour laquelle coexiste des zones de combustion de pré mélange et0 de diffusion, est souvent appelée flamme partiellement pré mélangée ou flamme triple, sous certaines conditions. [12]

II.2.1 .3 Auto-inflammation

Ce mécanisme, illustré sur la figure II.10 est le plus simple : les réactifs mis en contact s'auto-inflammation spontanément. Ce mécanisme remplit à la fois les rôles d'allumage (pas d'apport d'énergie extérieur pour initier la réaction) et de stabilisation. La flamme ne se développe en général qu'à partir d'une distance d_i, distance d'auto inflammation. Un pré-mélange se forme d'abord en aval des lèvres du brûleur puis s'enflamme spontanément ensuite. En pratique, ce mécanisme d'auto-inflammation se rencontre dans deux situations :

- le couple de réactifs réagit spontanément dans les conditions d'injection. Ce n'est pas le cas des combustibles usuels pour les conditions atmosphériques. Par ailleurs, la réaction hydrogène/ fluor, utilisée pour réaliser des lasers chimiques, est spontanée dans les conditions ambiantes ;
- au moins un des écoulements est préchauffé jusqu'à une température suffisante pour provoquer l'auto-inflammation. Cette situation se rencontre dans les « super statoréacteurs » (statoréacteurs en écoulement supersonique) où l'écoulement d'air est naturellement préchauffé par compression jusqu'à des températures de l'ordre de 1 000 K.

La connaissance, et la maîtrise, de la distance d'allumage $d_i$est primordiale pour la conception de ces foyers.

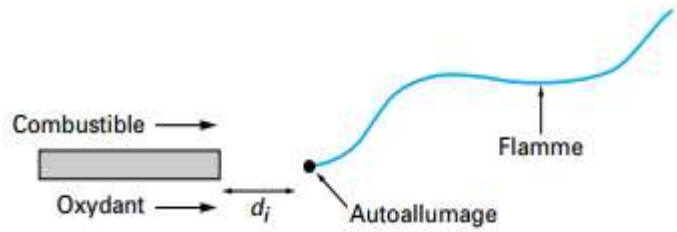


Figure (II.10) : Stabilisation d'une flamme de diffusion par auto-inflammation[13]

II.2.1 .b Stabilisation par zone de recirculation

Nous avons vu aux deux paragraphes précédents que la stabilisation d'une flamme sur les lèvres d'un brûleur maintenues suffisamment chaudes ou par une flamme triple en aval de celle-ci est relativement fragile. En effet, une perturbation minime des conditions opératoires peut conduire à une extinction non contrôlée de la flamme qui doit être évitée, ne serait ce que pour des raisons évidentes de sécurité. C'est pourquoi, la plupart des dispositifs pratiques ont recours à une stabilisation par zone de recirculation (ou en aval d'un« bluff-body », pour reprendre le terme anglais), illustrée sur la figure II.11. L'idée est d'opposer à l'écoulement un obstacle suffisamment grand, qui peut d'ailleurs être les lèvres du brûleur elles-mêmes, pour permettre le développement de zones de recirculation. Ces zones de recirculation, utilisées également pour la stabilisation des flammes pré-mélangées, offrent deux avantages évidents :

- elles créent et maintiennent dans l'écoulement des points de vitesses suffisamment faibles pour permettre un accrochage de type « flamme triple » de la flamme.
- elles sont susceptibles de constituer un réservoir de gaz chauds (recirculation des gaz issus de la combustion) à température suffisante pour enflammer les réactifs.

Si la structure interne de ces zones de recirculation n'est pas toujours bien comprise ni parfaitement décrite par les modèles, ce processus de stabilisation est à la fois simple à fabriquer et particulièrement efficace. C'est pourquoi il est utilisé dans la quasi-totalité des applications pratiques.

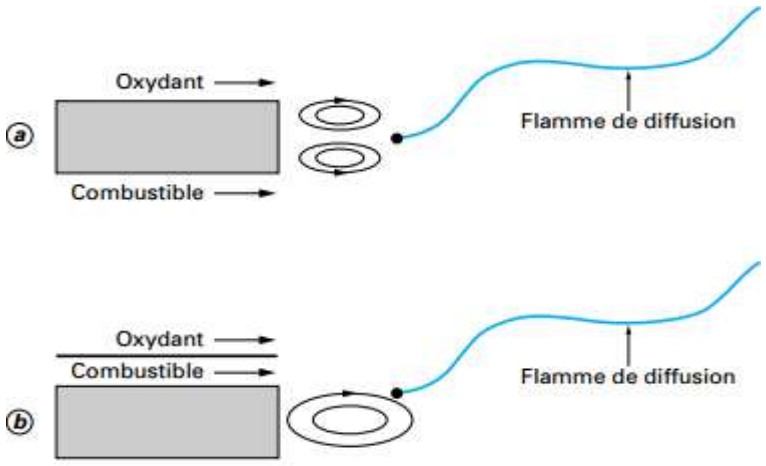


Figure (II.11) : Flamme de diffusion stabilisée en aval d'une zone de recirculation.[13]

L'obstacle qui génère la zone de recirculation peut séparer les deux écoulements combustibles et oxydants (a) ou se trouver à la périphérie.

II.2.1 .c Flamme pilote

Il s'agit cette fois de « forcer » l'inflammation des réactifs par l'utilisation d'une petite flamme annexe, généralement située au voisinage des lèvres du brûleur (voir figure II.12). Cette petite flamme est le plus souvent pré-mélangée. Cette configuration est parfois utilisée pour la stabilisation de flamme de grandes dimensions ou fonctionnant dans des conditions opératoires proches des limites d'extinction.

Remarquons que les veilleuses de chauffe-eau ou de chaudières jouent, dans une certaine mesure, le rôle de flamme pilote, au moins pour provoquer l'allumage des flammes principales.[14]

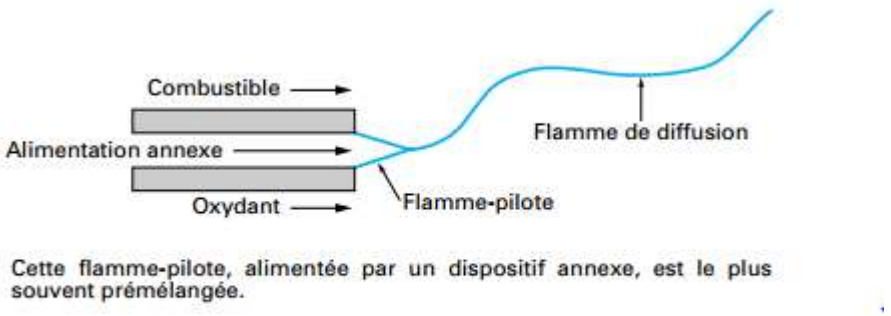


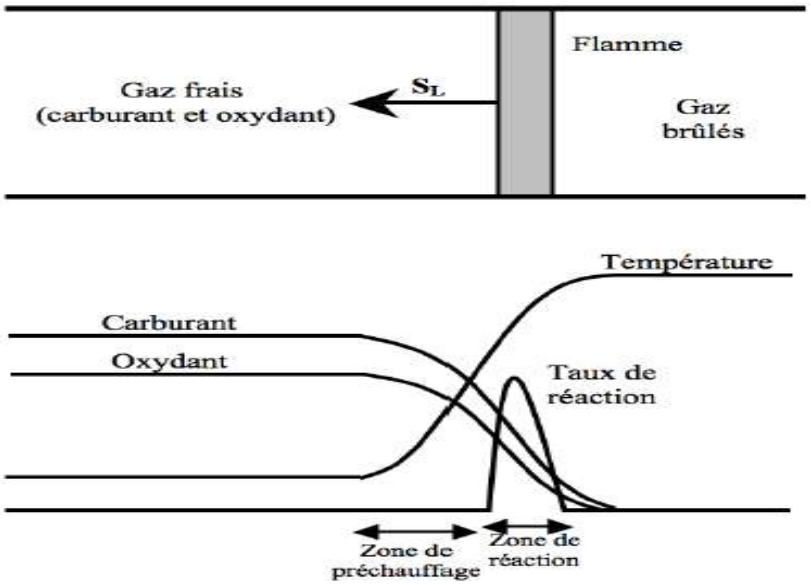
Figure (II.12) : Stabilisation d'une flamme de diffusion par flamme pilote[13]

II .2.2.Stabilité de flamme en milieu pré-mélangé

II. 2.2.1 Structure d'une flamme pré-mélangée

Dans le cas de la flamme pré mélangée, comme le montre la figure II.13, carburant et oxydant sont mélangés initialement avant la zone de réaction et la combustion a lieu lorsque ces réactifs atteignent une température suffisante dite température d'auto-inflammation. Ces flammes ont la capacité de se propager dans l'espace des gaz frais. La vitesse de flamme laminaire (notée *SL*) caractérise ce déplacement. En effet, la zone de flamme en cours de combustion fournit de la chaleur aux gaz frais voisins permettant ainsi leur inflammation. L'étude de ces caractéristiques Propagatrices du front de flamme présente un intérêt

particulier dans le cadre d'une étude de stabilité, puisque l'aptitude de la flamme à se propager avec une vitesse plus ou moins importante est un des mécanismes mis en jeu dans le processus de stabilisation. [15]



Figure(II.13) : Schéma du principe de la flamme 1D pré-mélangée[10]

II. 2.2.1.a) Epaisseur de flamme laminaire :

La zone de réaction est limitée à une couche de faible épaisseur. La région de la flamme correspond à la région présentant un gradient de température. Cette zone d'épaisseur δ_L est divisée en deux régions distinctes (figure II.13):

-épaisseur de préchauffage δp où dominent les phénomènes de diffusion et de convection de masse et de chaleur, dans cette zone les réactions chimiques sont négligeables,

-épaisseur de réaction δr où le dégagement de chaleur se fait par les réactions chimiques exothermiques

.

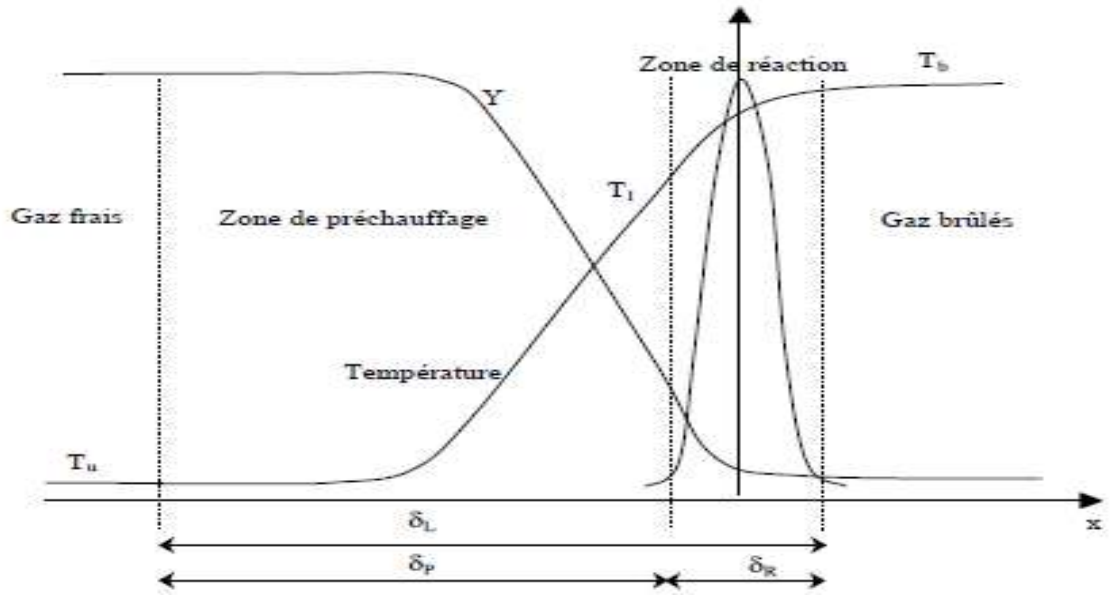


Figure (II.41): Structure d'un front de flamme de pré-mélange laminaire.

L'épaisseur totale de la flamme est $\delta_R+\delta_p=\delta_L$. Cette épaisseur, introduite en premier lieu par Zeldovitch, est une grandeur caractéristique des flammes de pré mélange laminaires. Dans le cas des grandes énergies d'activations ($\beta \longrightarrow \infty$), δ_R, égal au rapport δ_p/β, devient négligeable devant δ_p. L'épaisseur est alors assimilée à la zone de préchauffage. Par analyse dimensionnelle, on peut écrire l'épaisseur de flamme :

$$\delta_L = \frac{\lambda}{\rho_u C_p S_L^{\,o}} \qquad \text{(II.3)}$$

Où λ est la conductivité thermique, C_p la chaleur spécifique, ρ_u la masse volumique du pré mélange de gaz frais et $\delta_L°$ la vitesse de propagation de flamme laminaire. Cette quantité est représentative de l'épaisseur à l'intérieur de laquelle les gaz frais sont chauffés jusqu'à la température d'inflammation par la zone de réaction.

II. 2.2.1.b). Vitesse de flamme

Nous avons vu que la flamme de pré-mélange a la capacité de se propager dans un écoulement de gaz. La vitesse de propagation de flamme est donc une caractéristique essentielle pour définir une flamme de pré-mélange laminaire. L'étude des caractéristiques propagatives d'un front de flamme présente un intérêt particulier dans le cadre d'une étude de stabilité. En effet l'aptitude de la flamme à se propager avec une vitesse plus ou moins importante est un des mécanismes mis en jeu dans le processus de stabilisation.

La vitesse spatiale $\vec{w}$ est celle avec laquelle se propage une aire élémentaire dA de la surface du front de flamme dans le référentiel du laboratoire. Si le pré-mélange fluide est lui-même en mouvement à la vitesse $\vec{u}$, une vitesse de propagation de la flamme $\vec{V}_P$ est alors définie dans le référentiel du fluide en mouvement :

$$\vec{V}_P = \vec{V}_N = -\vec{u} \tag{II.4}$$

Cette vitesse de propagation est dépendante des déformations locales du front de flamme, une vitesse de flamme plane laminaire non étirée $S_L°$ est définie.

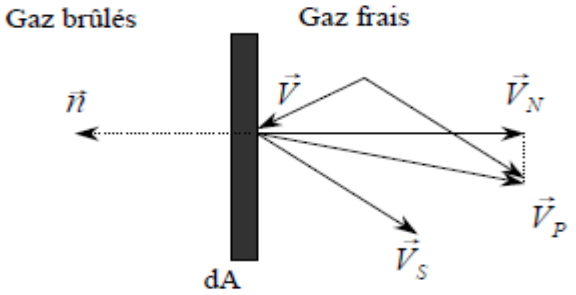


Figure (II.15): représentations des vitesses de l'écoulement de la flamme sur un élément de surface du front de flamme dA.[12]

La vitesse fondamentale S_d de déplacement ou de propagation d'un front de flamme pré-mélangé laminaire est la composante normale de sa vitesse de propagation $\vec{V}_P$ dans le référentiel du fluide en mouvement. La projection de la vitesse de propagation sur la normale au front de flamme est notée $\vec{V}_N$ sur la figure II.12 : $S_d = || \vec{V}_N ||$

Dans le cas idéal d'une flamme plane stabilisée sur un brûleur,

$$\vec{V}_p = \vec{w} - \vec{u} \tag{II.5}$$

Cette vitesse de propagation de la flamme est définie relativement aux gaz frais (indice *u)* en écoulement à la vitesse $\vec{u}$, elle est notée $\vec{V}_P$ ou $\vec{V}_{Pu}$. Une vitesse de propagation de la flamme relative aux gaz brûlés (indice b) en écoulement à la vitesse $\vec{u}_b$ est également définie:

$$\vec{V}_{Pb} = \vec{w} - \vec{u}_b . \tag{II.6}$$

La conservation de la masse au travers du front de flamme permet d'écrire la relation suivante :

$$\rho_u \vec{V}_{PNu} = \rho_b \vec{V}_{PNb} \,. \tag{II.7}$$

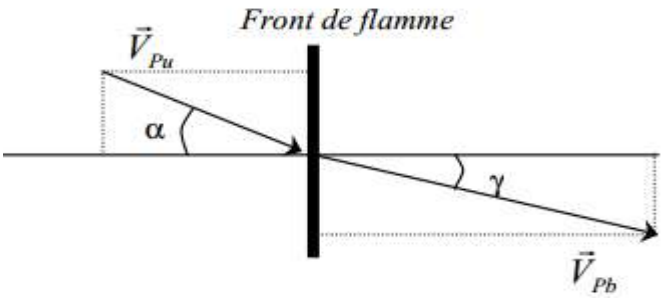


Figure (II.16)*:* Déviation des lignes de courant au travers du front de flamme.

En négligeant les forces de frottements et les forces à distance, l'équation de bilan de quantité de mouvement projetée tangentiellement sur le front de flamme s'écrit :

$$\frac{\partial(\rho V_{PN} V_{PT})}{\partial N} + \frac{\partial(\rho V_{PN} V_{PT})}{\partial T} = -\frac{\partial p}{\partial T} \tag{II.8}$$

Où V_{PN} et V_{PT} sont les projections de la vitesse de propagation normalement et tangentiellement au front de flamme. Si on considère un front de flamme plan et si chaque point se trouve dans le même état, aucune variable ne dépend de la composante tangentielle, alors $\frac{\partial P}{\partial T}$ est nul et $PV_{PN}V_{PT}$ est Constant à la traversée du front de flamme. Nous avons vu précédemment la relation $p_u V_{Pu}$cosa = $p_b V_{Pb}$cos Y, ce qui permet d'écrire:

$$\rho_u V_{Pu} \cos\alpha = \rho_b V_{Pb} \cos\gamma \tag{II.9}$$

Sous ces conditions, la composante V_{PT} est alors constante au travers du front de flamme.

Finalement :

$$V_{Pu} \sin\alpha = V_{Pb} \sin\gamma \text{ et } \rho_b \tan\alpha = \rho_a \tan\gamma \,. \tag{II.10}$$

II.2.2.2 Stabilisation des flammes de pré-mélange

En milieu pré-mélangé, on parle de stabilisation de flamme lorsque le flux de gaz frais pré-mélangé s'écoule dans une direction opposée à la propagation de l'onde de combustion et à une vitesse égale à la vitesse de propagation de la flamme (Glassman, 1987). La flamme devient alors stationnaire relativement au brûleur.

Dans le cas particulier d'un brûleur de type bec Bunsen (figure II.17), on pourra dire que la flamme est maintenue stable si sa vitesse de propagation est équivalente à la vitesse de l'écoulement localement

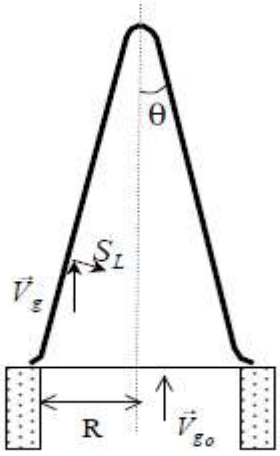


Figure (II.17): Stabilisation d'une flamme sur un brûleur de type Bunsen[12]

La flamme est considérée comme conique et fait un angle Θ avec la vitesse V_g de l'écoulement de gaz frais. On a alors :

$$\sin\theta = \frac{S_L}{V_g} \qquad \text{(II.11)}$$

Où S_L est la vitesse de propagation du front de flamme et V_g la vitesse de l'écoulement. Lorsque la vitesse de l'écoulement augmente, l'angle formé par le cône diminue. La composante de la vitesse de l'écoulement normale au front de flamme reste ainsi égale à la vitesse de propagation.

Cette formulation simplifiée met en avant le fait que pour un mélange donné et pour une vitesse de l'écoulement fixée, l'angle Θ est constant, ce qui donne à la flamme a une forme conique.

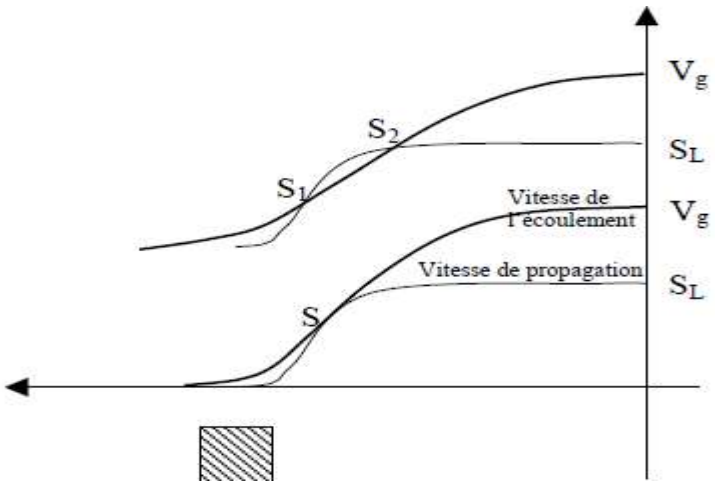
Toutefois, la répartition de vitesse du mélange réactif V_g n'est pas uniforme à la sortie du brûleur. En effet la vitesse est nulle ou très faible près des parois et maximale sur l'axe. Par ailleurs, pour une même section de l'écoulement, la vitesse de propagation de la flamme S_L

n'est pas constante. En effet, le brûleur agit comme un puits de chaleur et de radicaux diminuant ainsi la vitesse de propagation. En particulier, les lèvres du brûleur et la régionproche de la sortie de l'écoulement fournissent les conditions propices à la position de stabilisation.

Dans la configuration d'un brûleur de type Bunsen, telle que présentée sur la figure (II.17), on considère un écoulement de type laminaire. Comme le montre la figure (II.18), il peut exister deux points (S_1 et S_2) pour lesquels la vitesse de l'écoulement V_g est égale à la vitesse de flamme S_L si la vitesse de l'écoulement n'est pas trop importante par rapport à la vitesse de flamme. Malgré cela, ces points de fonctionnement sont des points instables car entre ces deux positions, la vitesse de flamme excède la vitesse de l'écoulement, la flamme peut donc remonter l'écoulement. Ces deux points existent pour plusieurs sections droites de l'écoulement, mais c'est pour la section la plus proche du brûleur où les deux courbes sont tangentes au point S que la flamme se stabilise.

Si la vitesse du gaz au centre de l'écoulement $V_g(0)$ est trop grande, ou si la vitesse S_L est trop faible, la stabilisation est impossible car les courbes V_g et S_L ne peuvent pas se couper, la flamme disparaît, c'est le soufflage (ou "blow out" en anglais).

Au contraire, si la vitesse V_g est trop faible, le point de stabilisation S devient trop proche des parois du bec, la flamme remonte alors l'écoulement et rentre dans le tube d'injection, c'est le retour de flamme (ou "flashback" en anglais).



Figure(II.18):profil de vitesse de l'écoulement et de vitesse de flamme à la sortie d'un brûleur de type Bunsen[12].

On peut représenter qualitativement dans le plan richesse - vitesse de l'écoulement, le diagramme de stabilité d'un brûleur de type bec Bunsen (figure II.18). On obtient alors le domaine d'existence d'une flamme sur ce type de brûleur. La combustion est stable pour un domaine compris entre deux courbes critiques : le soufflage et le retour de flamme.

Lorsque la richesse dépasse 1, une flamme de diffusion se forme autour de la flamme de pré-mélange et on ne peut plus parler de régime de combustion purement pré-mélangé.

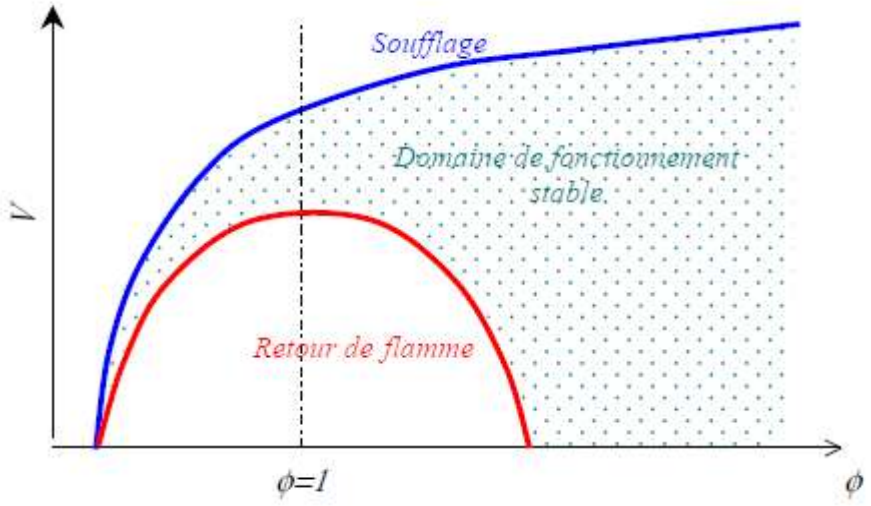


Figure (II.19): Représentation qualitative de la stabilité de la flamme sur un brûleur de type Bunsen dans le plan vitesse de sortie de l'écoulement-richesse du pré-mélange(12]

L'augmentation de la vitesse avec la richesse est plus rapide pour la limite de soufflage que pour la limite de retour de flamme. Au-delà de la stœchiométrie, la vitesse limite de soufflage continue à croître tandis que la vitesse limite de retour de flamme décroît avec la richesse. Ce phénomène s'explique par le fait que le phénomène de décollement se produit dans l'air ambiant permettant la diffusion de l'air dans le pré-mélange de gaz et l'augmentation de la vitesse de flamme. Des expériences de décollement réalisées avec un écoulement annulaire extérieur d'azote ont montré que la vitesse limite de décollement présentait la même allure que la vitesse limite de retour de flamme en fonction de la richesse.

Ces remarques mettent en avant le fait que pour comprendre les mécanismes qui stabilisent une flamme, il est nécessaire de s'intéresser aux limites d'existence de ces mécanismes et donc aux limites de stabilité. L'étude des instabilités de combustion permet de comprendre les phénomènes physiques locaux qui sont responsables des limites de stabilité et donc de la déstabilisation d'une flamme.

II.2.2.3Limites de stabilité

Les points développés dans les paragraphes précédents mettent en avant la nécessité de bien comprendre les mécanismes de stabilité de flammes pour envisager de maîtriser les limites de stabilité. L'intérêt de bien comprendre les limites de stabilité est évident pour la conception d'un brûleur Bunsen mais également pour tous les brûleurs de flammes pré-mélangées. L'objectif est d'optimiser le fonctionnement en ayant la plus grande plage de fonctionnement possible, c'est-à-dire une gamme maximale de débit accessible sans rencontrer de problème de stabilité.

Dans le cas d'un brûleur de type Bunsen, la question est de savoir quel est le diamètre optimal de sortie pour une flexibilité maximale. Plusieurs règles on tété établie empiriquement. Le diamètre de sortie du brûleur doit être au minimum égal à la distance d'extinction (quenching distance), d_T. La distance d'extinction, est définie comme étant le diamètre maximum du tube qui ne permet pas le retour de flamme dans le tube. La flamme s'éteint car la diffusion des espèces et de la chaleur, deux mécanismes qui favorisent la propagation de flamme sont affectés par la réduction du diamètre du brûleur. Plus le diamètre est petit, plus le rapport de surface est grand, plus les pertes de chaleur et les collisions sont importantes. Un autre critère de stabilité est basé sur la vitesse de sortie de l'écoulement. Elle doit être au moins égale à deux fois la vitesse de propagation laminaire, sinon, aucun cône ne sera formé à la sortie du brûleur. La vitesse de sortie ne doit pas dépasser cinq fois la vitesse de flamme, sinon, le combustible pénètre le cône (Lewis G Von Elbe, 1987).

Si l'on considère le diagramme général de stabilité d'une flamme de pré-mélange (figure II.19), une solution simple pour éviter le retour de flamme est de fixer la richesse à des valeurs suffisamment importantes pour ne pas rencontrer cette limite de stabilité dans la gamme de vitesse d'éjection considérée. Pour cela, le diamètre de sortie du brûleur et la vitesse d'éjection des gaz peuvent être fixés de manière à obtenir la richesse qui satisfait cette condition.

II .2.3. Flammes partiellement pré-mélangées

Les deux premières parties de ce chapitre exposent la stabilité de flamme sous deux aspects distincts: les flammes non pré-mélangées et les flammes pré-mélangées. C'est en effet la manière la plus fréquemment utilisée pour exposer les problématiques liées à la combustion. Cependant, pour expliquer certains phénomènes de stabilisation, il a fallu

introduire un nouveau régime de combustion qui s'impose comme une "passerelle" entre les deux régimes classiques. Ce nouveau régime appelé partiellement pré-mélangé s'est avéré être présent dans un très grand nombre de situations.

Le régime partiellement pré-mélangé est établi lorsque les deux régimes de combustion classiques, pré-mélangé et non pré-mélangé, coexistent. Ce type de combustion peut avoir lieu si l'écoulement est composé d'un mélange riche adjacent à un mélange pauvre. Les conditions de gradient de richesse ainsi crées permettent d'obtenir des flammes partiellement pré-mélangées. Ces flammes ont à la fois les propriétés des flammes pré-mélangées et des flammes de diffusion. L'intérêt de ce type de flamme est certain puisqu'on bénéficie des avantages de chaque régime de combustion en termes de sécurité, de contrôle des émissions et de stabilité de flamme.

Dans de nombreuses configurations propices aux flammes de diffusion, une zone de mélange entre les réactifs peut avoir lieu avant la zone de réaction (Muniz G Mungal, 1997 ; Lyons, 2000). Dans ces conditions, il s'agit de flammes partiellement pré-mélangées.

Le régime de flamme partiellement pré-mélangé se retrouve également lors des situations d'écoulements très perturbés où les flammes subissent des extinctions locales. Le ré allumage de régions de flamme localement éteintes se fait souvent dans des conditions de flammes partiellement pré-mélangées (Favier G Vervisch, 2001 ; Lyons et al. 2005).

Nous verrons que les flammes partiellement pré-mélangées peuvent également être présentes dans une configuration initiale de pré-mélange (Plessing et al. 1998 ; Puri et al., 2001). En effet, si le pré-mélange de réactif est riche, une seconde zone de combustion de nature non pré-mélangée entoure la zone de combustion pré-mélangée. Cette situation est également favorable à la présence simultanée des deux natures de flammes.

Dans la pratique, ces flammes sont présentes dans de nombreux systèmes de combustion allant des fours industriels aux brûleurs à gaz domestiques, mais également dans les systèmes de combustion mettant en œuvre des sprays de combustible, pour lesquels l'évaporation des gouttes combinée à un mauvais mélange permet d'obtenir des gradients de richesse importants.

Les flammes partiellement pré-mélangées sont généralement décrites sous la forme d'une tête de flamme de pré-mélange éventuellement prolongée par une queue correspondant à une flamme de diffusion. On a vu que la flamme de pré-mélange peut elle-même être constituée d'une aile riche et d'une aile pauvre. La zone riche est déficitaire en oxydant et dépend alors de la zone pauvre pour l'apport en oxygène nécessaire à la combustion. En contrepartie, la zone pauvre bénéficie de l'apport de chaleur et de radicaux provenant de la zone riche, si bien que même si les conditions de richesse dans la zone pauvre sont en dessous des limites d'inflammabilité, la combustion peut avoir lieu.

La forme de la zone de réaction dépend du gradient de fraction de mélange qu'elle rencontre. Selon l'importance de ce gradient, une queue de diffusion peut apparaître. Cette zone de diffusion existe par la présence d'imbrûlés issus des branches de pré-mélange et qui diffusent normalement à la ligne stœchiométrique. Lorsque le gradient est suffisamment faible, la flamme admet une structure que l'on désigne par flamme triple. La flamme triple est composée de deux branches de pré-mélange, une branche de pré-mélange riche et une pauvre. Une zone de combustion de diffusion prend place entre ces deux branches de pré-mélange et les trois composantes de la flamme se rejoignent en un point commun appelé "point triple".

La flamme partiellement pré-mélangée peut également prendre une forme "ailée". Elle ne se compose alors plus que d'un noyau pré-mélangé suivi d'une queue de diffusion. Cette flamme est observée pour des gradients de fraction de mélange importants.

Cette structure bien particulière que l'on appelle flamme partiellement pré-mélangée peut être observée aussi bien lors d'une expérience de décollage de flammes de diffusion que lors d'une expérience où l'on introduit un pré-mélange riche dans un brûleur.

Les flammes partiellement pré-mélangées ont pu être observées lors d'expériences mettant en jeu des flammes de diffusion suspendue (figure II.20). L'injecteur de combustible présente généralement un diamètre très faible (de 3 à 5 mm) et les auteurs utilisent un écoulement annulaire extérieur d'air. La flamme est suspendue assez loin de l'injecteur (hauteurs de suspension atteignant jusqu'à 10 cm) de telle manière que le mélange du réactif et du comburant se fasse et donne lieu à un gradient de fraction de mélange en amont de la flamme. Une flamme partiellement pré-mélangée suspendue en aval dans l'écoulement est alors observée.

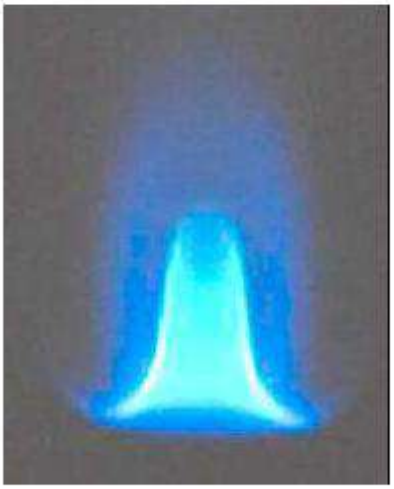


Figure (II.20):Structure d'une flamme partiellement pré-mélangée - configuration initiale de diffusion (Chung= Lee, 1991)[12]

Une autre possibilité pour obtenir des flammes partiellement pré-mélangées, est l'introduction dans un injecteur d'un mélange dont la richesse est supérieure à la stœchiométrie adjacent à un mélange pauvre.



Figure (II.21): Structure d'une flamme partiellement pré-mélangée - configuration initiale de pré-mélange (Locket al, 2005)[12]

Les flammes peuvent alors être accrochées au brûleur ou encore stabilisées en aval non loin de l'injecteur (Puri et al. 2001 ; Lock et al. 2005). Dans le cas d'une flamme suspendue, une flamme de pré-mélange riche est observée au centre de l'écoulement et une flamme de diffusion s'établit à l'extérieur. Une flamme de pré-mélange pauvre est observée à l'extérieur.
Si la flamme est stabilisée sur le brûleur, on observe une flamme centrale de pré-mélange riche entourée d'une flamme de diffusion. La flamme extérieure de pré-mélange pauvre existe si un mélange pauvre adjacent au mélange riche est introduit. En remplaçant le mélange pauvre par de l'air, une autre structure de flamme est observée. La flamme ainsi stabilisée sur le brûleur n'a plus de branche pauvre, on la définit alors par "flamme double" (Lock et al.2005).

II .2.3.2Stabilisation des flammes partiellement pré-mélangées

Le comportement des flammes partiellement pré-mélangées a été étudiées par de nombreux auteurs car, comme on l'a vu, ces flammes sont présentes dans de nombreuses applications et jouent un rôle essentiel dans le phénomène de stabilisation.

Les premières théories concernant la stabilisation de flammes supposent que la turbulence permet de mélanger suffisamment les réactifs sur une distance qui sépare la flamme suspendue et le brûleur (Vanquickenborn G Van Tiggelen, 1966). L'extrémité de la flamme est considérée comme une flamme de pré-mélange se propageant à la vitesse S_T, vitesse de flamme turbulente. La flamme se stabilise alors à une hauteur H pour laquelle la vitesse de l'écoulement est égale à la vitesse S_T. Des études expérimentales ont par la suite montré que l'extrémité de la flamme ne se situait pas forcément dans une zone où le mélange est à la stœchiométrie.

Une autre approche propose que la stabilisation de la flamme est gouvernée par les grandes structures de l'écoulement qui se développent à l'interface entre le combustible et l'air(Broadwell J. E. G Breidenthal R. E., 1982). Ces grosses structures vont entraîner et brasser de l'air provenant de la périphérie dujet, des gaz brûlés issus de la combustion, et du combustible en excès. Selon les différents auteurs, si le temps de mélange de ces trois composés est suffisamment long pour permettre à la réaction chimique de s'établir, alors la stabilisation de la flamme est possible.
Par la suite, Peters et Williams ayant postulé que le mélange à la base de la flamme n'est pas réalisé parfaitement, proposent une analyse basée sur le concept de flamme lettes (Peters et Williams, 1983). La flamme est considérée comme une flamme de diffusion pure. La combustion devient impossible dès que le taux d'étirement dépasse un seuil critique

d'extinction. La stabilisation à la base de la flamme est alors contrôlée par le taux de dissipation scalaire x

$$\chi = 2D \cdot \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2 = 2D \cdot |\nabla Z|^2 \qquad \text{(II.12)}$$

Où Z est la fraction de mélange et D le coefficient de diffusivité massique.

L'arrêt de la combustion se produit lorsque le taux de dissipation scalaire instantané atteint une valeur critique.

Ces modèles tenant compte uniquement des propriétés propagatives ou des propriétés diffusives des flammes ont ensuite laissé place à des modèles de flammes partiellement pré-mélangées.

Plusieurs études expérimentales ont mis en avant le fait que les flammes de diffusion suspendues présentent en réalité une extrémité qui a un caractère propagatif. Par imagerie directe ou encore par Fluorescence Induite par Laser, la base de la flamme a été mise en évidence comme une région présentant une réactivité plus importante que les autres régions de la flamme partiellement pré-mélangée (Lee et Chung, 2001). Le niveau de mélange évolue très peu dans la zone de stabilisation ce qui signifie que la base de la flamme est pilotée par le régime de pré-mélange (Mansour, 2003). Cette partie propagative de la flamme se stabilise en équilibre avec la vitesse locale de l'écoulement et adapte sa structure en fonction de l'écoulement. Les observations expérimentales sont en accord avec les résultats de simulations numériques et montrent que la vitesse à la base de la flamme passe par une phase de décélération avant d'accélérer rapidement sous l'effet de l'expansion des gaz chauds (Mungal G Muniz, 1997).

Si l'on considère une flamme de pré-mélange soumise à un faible gradient de mélange et que l'on impose une légère augmentation de ce gradient, alors une flamme de diffusion peut apparaître en aval de la flamme de pré-mélange (Kim et al. 2005). Dans ces conditions, la flamme de pré-mélange est alors faiblement incurvée et l'effet de l'étirement est très faible, la zone de réaction de pré-mélange est donc peu modifiée. La réaction additionnelle d'une flamme de diffusion contribue à l'augmentation de la vitesse de propagation. En effet, la présence de la flamme de diffusion résulte en une augmentation de la température des gaz brûlés en aval de la flamme de pré-mélange ce qui a pour effet d'augmenter l'expansion volumique des gaz et ainsi la vitesse de propagation de la structure.

Certaines flammes partiellement pré-mélangées sont donc constituées d'un front de pré-mélange courbé avec deux branches pauvre et riche, suivi d'une flamme de diffusion. Ce

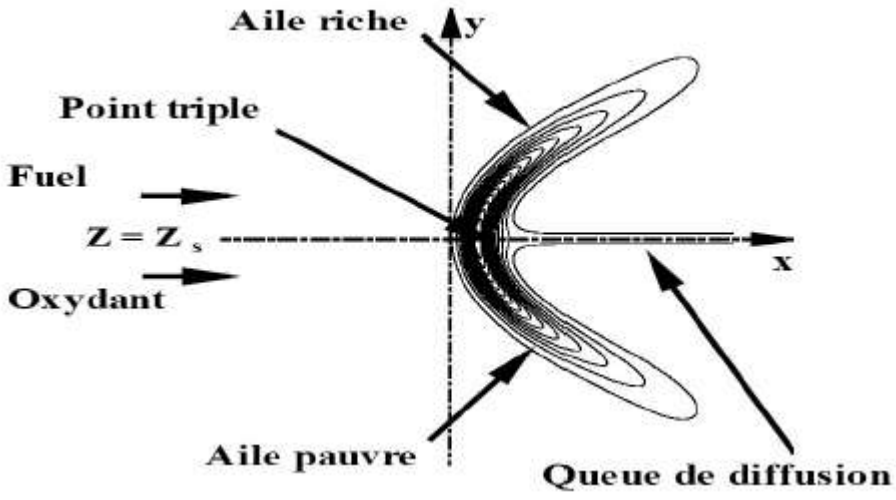
type de flamme a été décrit précédemment sous le terme de flamme triple et a fait l'objet d'une attention particulière ces dernières années concernant l'étude de sa structure et de sa stabilisation.

II .2.3.3Flammes triples

Une des théories pour expliquer la stabilisation des flammes de diffusion suspendues repose sur le fait que le mécanisme de stabilisation est assuré dans un milieu partiellement pré-mélangé par une structure particulière de flamme, appelée flamme triple, qui se propage en amont de l'écoulement.

Expérimentalement, cette structure réactionnelle a été observée pour la première fois par Phillips dans une couche de mélange composée de méthane et d'air (Philipps, 1965). De nombreuses études aussi bien numériques (Ruetsch et al. 1995 ; Plessing et al, 1998 ; Puri et al., 2001) qu'expérimentales ont suivi (Kioni et al., 1999 ; Watson G Lyons, 2000 ; Lee et al., 1997).

La flamme triple telle que décrite par Boulanger et al. est composée de deux branches de pré-mélange et d'une branche de diffusion (Figure II.22) (Boulanger et al. 2002). Les conditions de l'écoulement imposent un gradient de richesse en amont de la flamme, mettant ainsi en présence une zone de mélange riche ($Z>Z_s$) et une zone de mélange pauvre ($Z<Z_s$) [10].



Figure(II.22): Structure d'une flamme triple (Boulanger et al. 2002)[10]

Cette structure de flamme triple joue un rôle capital dans la propagation et la stabilisation des flammes non-pré-mélangées. Sa caractérisation peut donc être une première étape pour la compréhension du mécanisme de stabilité des flammes partiellement pré-mélangées. L'importance des flammes triples pour étudier les mécanismes de stabilité des flammes, notamment dans des problématiques de vitesse de propagation et d'accrochage de flamme, a été largement mise en évidence dans la littérature. Selon plusieurs études, la base de la flamme triple (le point triple) se propage le long de la ligne stœchiométrique ; la flamme suspendue devrait donc se stabiliser lorsque la vitesse d'écoulement est proche de la vitesse de propagation d'un pré mélange stœchiométrique.

En introduisant l'effet du dégagement de chaleur sur la vitesse de flamme, Ruetsch et al. Ont montré numériquement que la flamme triple est principalement contrôlée par deux paramètres interdépendants qui sont le taux de dégagement de chaleur et la courbure du front de flamme. D'après ces auteurs, les lignes de courant de l'écoulement, sous l'effet de l'expansion thermique, divergent en amont du point triple de la flamme ; la vitesse décroît alors au niveau du point triple pour atteindre une valeur proche de celle d'une flamme plane laminaire à la stœchiométrie (*SL* 0). La flamme se stabilise donc dans cette zone où la vitesse de flamme est en équilibre avec la vitesse locale de l'écoulement. Cette vitesse a été mesurée par de nombreux autres auteurs qui obtiennent effectivement des valeurs très proches de la vitesse de propagation d'une flamme plane laminaire stœchiométrique.
Par ailleurs, les conditions du mélange influencent fortement la courbure du front de flamme et par conséquent la vitesse de propagation, qui est sensible à l'étirement de la flamme courbée. L'influence du gradient de la fraction de mélange sur la vitesse de propagation n'est pas dé- terminée formellement ; et toutes les études n'aboutissent pas aux mêmes conclusions. Mais, la plupart des auteurs ont conclu que la vitesse de propagation décroît avec l'augmentation du gradient de la fraction de mélange. D'autres auteurs ont déterminé une valeur critique de ce gradient à partir de laquelle une augmentation de celui-ci induit une diminution de la vitesse de propagation. Ce résultat est en accord avec les auteurs précédents et peut s'expliquer par l'effet de l'étirement sur la vitesse de propagation. Des analyses plus détaillées sur les mécanismes de stabilité des flammes partiellement pré-mélangées et des flammes triples sont présentées dans les travaux de thèse de Lacour et de Boulanger [12].

II .2.3.3Flammes doubles

Les paragraphes précédents mettent en avant le fait que le régime de flamme partiellement pré-mélangé couvre un large domaine de flammes s'établissant dans différentes configurations d'écoulements. Ces flammes présentent toutes la particularité d'être constituées de zone de flamme pré-mélangée et de zone de flamme de diffusion, cependant la structure est modifiée en fonction des vitesses de l'écoulement et du gradient de fraction de mélange rencontrés par la flamme.

Un type particulier de flamme partiellement pré-mélangé est défini sous le terme de "flamme double". Ces flammes doubles ont pu être rencontrées dans des configurations de flammes de diffusion (Watson G Lyons, 1999). Lorsque l'écoulement est fortement turbulent, la branche de pré-mélange riche, branche interne à l'écoulement de combustible, se replie le long de la branche de diffusion est ne peut plus être visualisée (Figure II.23).

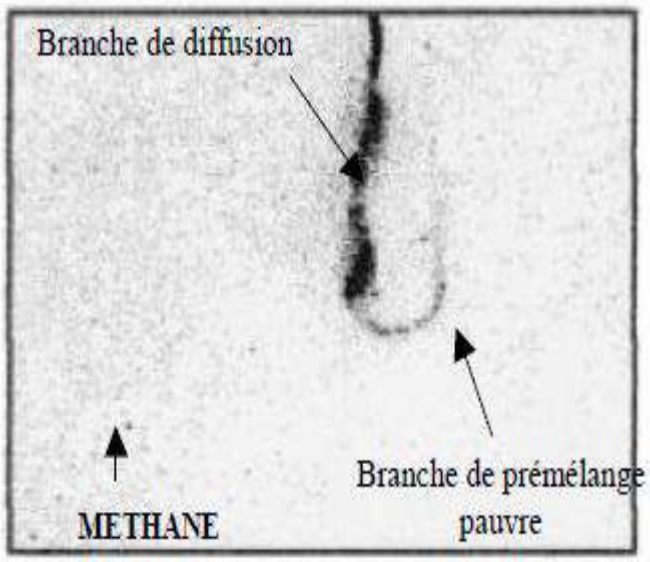


Figure II.23: Image de fluorescence du radical CH - extrémité de flamme double (Watson = Lyons, 1999)[10]

La transition d'une flamme triple vers une flamme double a également été observée par la disparition de la branche de pré-mélange pauvre. Qin et al. étudient la propagation d'une flamme triple initiée en aval d'un écoulement de pré-mélange riche (Qin et al., 2004). La flamme se propage vers la sortie du brûleur et rencontre un gradient de fraction de mélange de plus en plus important si bien que la branche de pré-mélange pauvre se replie le long de la

branche de diffusion. Finalement, la flamme stabilisée aux lèvres du brûleur est alors une flamme double (figure II.20). D'autres auteurs caractérisent cette flamme double directement à partir d'une flamme stabilisée aux lèvres d'un brûleur en introduisant un mélange riche à l'intérieur d'un écoulement d'air (Shu et al. 1998 ; Locketal., 2005).

Mise à part la disparition de la branche riche ou de la branche pauvre, les pr²opriétés de ces flammes doubles sont très proches des flammes triples (Puri et al, 2001). C'est typiquement ce type de flamme composé d'une branche de pré-mélange riche enveloppée d'une zone réactionnelle de diffusion que l'on va retrouver dans la configuration des brûleurs domestiques. En effet, nous allons voir que l'introduction d'un pré-mélange riche par les fentes de sortie du brûleur laisse place à des flammes partiellement pré-mélangées constituées d'une flamme centrale de pré-mélange enveloppée d'une seconde zone de combustion de type diffusion, comme représentée sur la (Figure II.24). Ces deux zones de combustion se rejoignent en un point et forment alors une flamme double telle que décrite précédemment.

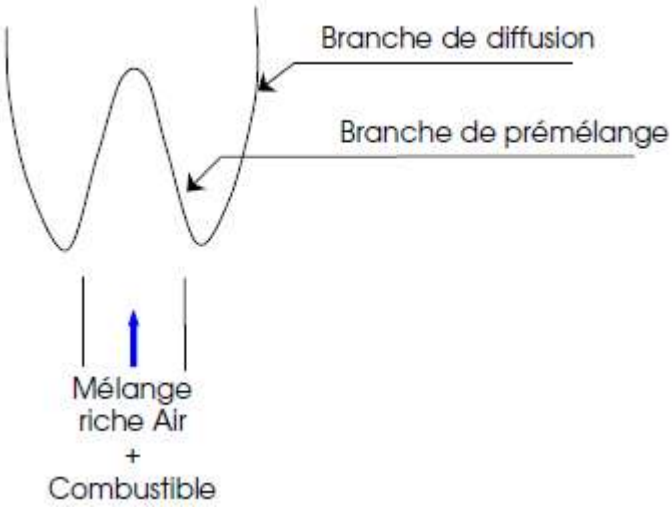


Figure (II.24): Structure de flamme double stabilisée sur un brûleur [10]

Dans cette première partie du manuscrit, les propriétés ainsi que le mode de stabilisation de chaque type de combustion, pré-mélangée et diffusion, ont été exposées. La flamme de diffusion peut être stabilisée par accrochage au nez du brûleur ou encore en suspension dans l'écoulement de gaz. Les mécanismes de stabilisation diffèrent selon les situations et nous avons vu que le comportement des flammes suspendues dépend essentiellement de la vitesse dujet. La flamme de pré-mélange est caractérisée par des propriétés particulières telles que son épaisseur ou la capacité de se propager. Cette flamme se stabilise par l'équilibre de sa vitesse de propagation et de la vitesse de l'écoulement. La vitesse

de l'écoulement est définie par la géométrie de l'injecteur et nous avons vu que la définition et la compréhension des limites de stabilité sont alors nécessaires pour le fonctionnement en régime stable d'un brûleur.

La flamme double, tout comme les flammes partiellement pré-mélangées en général, combine les propriétés de chaque type de flamme, pré-mélange et diffusion. En effet, ces flammes bénéficient d'une zone de réaction définie spatialement avec la capacité de se propager et la combustion est complétée par une flamme de diffusion. Les nombreuses études réalisées dans les années 90 portant sur les flammes partiellement pré-mélangées et les flammes triples ont permis de mieux comprendre ce type de combustion qui intervient dans de multiples applications courantes. Ces travaux ont été complétés par des études plus récentes et les mécanismes de stabilisation des flammes triples ont été approfondis.

Nous pouvons désormais nous appuyer sur ces récents acquis concernant la combustion en régime partiellement pré-mélangée pour apporter un regard nouveau sur les flammes de type double générées par les brûleurs domestiques. [12]

Conclusion :

Dans ce chapitre, on présenté le problème général de la stabilité de la flamme. Pour résoudre ce problème, on va utiliser le code CHEMKIN.

III. Introduction

Pour les développeurs qui ne nécessitent pas la vitesse ou des fonctionnalités avancées de CHEMKIN-PRO, **Reaction Design** propose **CHEMKIN** comme une alternative économique.

Jusqu'à 5 fois plus rapide que les codes commerciaux et universitaires compétitifs, CHEMKIN est un outil de simulation chimie robuste et mature qui a été largement utilisé pour une gamme impressionnante d'applications. CHEMKIN est une solution rentable pour les simulations de base qui utilisent de petites cinétiques ou des mécanismes de réaction réduits. CHEMKIN est 2 à 5 fois plus rapide que CHEMKIN II et contient de nombreuses améliorations et corrections qui ont été mises en œuvre depuis près de deux décennies de développement de CHEMKIN commerciale. Peut-être plus important encore, CHEMKIN vient avec le plein appui technique de Reaction Design, fournir des réponses rapides et des conseils sur la façon de mettre en place et d'analyser le logiciel de simulation de cinétique chimique permettent une enquête plus efficace du temps d'un nouveau processus de potentiel par rapport à l'enquête directe en laboratoire.

Un facteur important pour le développement et l'utilisation de CHEMKIN est la réduction des polluants, tels que les NOx. Comme ces polluants deviennent plus étroitement réglementés par des accords par des organismes tels que l'Agence de protection environnementale des États-Unis et le California Air Resource Board (CARB), les chercheurs font un usage croissant de la technologie de simulation.

Une limitation de CHEMKIN est qu'elle suppose le réacteur a une géométrie relativement simple, alors que parfois ce n'est pas le cas. Pour cette raison, un programme similaire appelé cinétique est souvent utilisé en conjonction avec des codes CFD.

III.1 Historique de chemkin

Au début des années 1980, Sandia National Laboratory a développé CHEMKIN et CHEMKIN II. Sandia avait et maintenu le droit d'auteur et la propriété des programmes de CHEMKIN et le nom CHEMKIN, bien qu'il distribué ce code largement aux collaborateurs à travers le monde. Jusqu'en 1997, les seules organisations autorisées de distribuer des versions de CHEMKIN étaient Sandia et le ministère de l'Énergie, de la science et l’Informations

techniques (OSTI). En 1995, Sandia a lancé un programme de licence payant pour la version actuelle de CHEMKIN II et la version initiale de CHEMKIN III.

En Février 1997, Sandia contracté avec Reaction Design deviennent le distributeur exclusif mondial de CHEMKIN. Actuellement, Reaction Design est le seul distributeur de logiciels CHEMKIN, bien que les parties qui initialement obtenu leur licence CHEMKIN II directement à partir de Sandia National Laboratory maintenaient et la capacité et les droits d'exécuter et de modifier leurs codes CHEMKIN originaux.

Depuis, Reaction Design a repris l'ensemble du développement, le soutien et la distribution de CHEMKIN. La dernière version, CHEMKIN 4.1, a été publiée en Juillet 2006.

III.2 Définition :

CHEMKIN est un outil de logiciel propriétaire pour résoudre des problèmes complexes de cinétique chimique. Il est utilisé dans le monde entier en combustion, le traitement chimique, la micro-électronique et de l'automobile industrie, et aussi en sciences de l'atmosphère. Il a été initialement développé au **Sandia National Laboratory** et est maintenant mis au point par une société américaine, **Rection design**.

CHEMKIN résout des milliers de combinaisons de réaction, de développer une compréhension globale d'un processus particulier, ce qui pourrait impliquer plusieurs espèces chimiques, des plages de concentration, et des températures de gaz.

III.3 Propriétés disponibles pour une utilisation dans la facilité d'étude Paramétrique :

Bien que des études de paramètres soient disponibles pour la plupart des propriétés dans un projet CHEMKIN-PRO, ils ne sont pas disponibles pour tous les biens qui sont accessibles dans le CHEMKIN-PRO Interface. On peut configurer une étude des paramètres pour les propriétés suivantes:

• paramètres de réaction Arrhenius à taux de phase gazeuse et de la surface des réactions.

• paramètres de taux de réaction auxiliaire (par exemple, l'efficacité de troisième corps et la pression pour les réactions en phase gazeuse, les paramètres de couverture dépendant pour des réactions de surface, etc.)

• La densité du site pour les phases de surface

• masse volumique apparente phase Surface

• les données de transport de propriété Espèces

• Propriétés des réacteurs

• Les propriétés des espèces-propriétés spécifiques et des données spécifiques au matériau pour tous les réacteurs dans un réseau

• Les propriétés de réacteurs, les espèces-propriétés spécifiques et des données spécifiques au matériau pour un seul réacteur

• propriétés de flux et des données spécifiques à l'espèce pour un flux d'entrée

• Certaines propriétés du Solveur.

III.4 Vue d'ensemble du logiciel CHEMKIN-PRO :

CHEMKIN-PRO comprend un large choix de modèles de réacteurs qui répondent à des conditions d'écoulement-réaction industrie spécifique. L'interface utilisateur facilite problème mis en place en guidant les entrées de l'utilisateur et permettant la construction visuelle des diagrammes réacteur réseau pour une modélisation de systèmes complexes. Les options de visualisation intégrées fournissent une représentation graphique rapide des résultats, ainsi que la possibilité d'exporter facilement les données pour une utilisation dans des outils d'analyse, tels qu'Excel.

En plus de la suite flexible de réacteurs modèles configurables par l'utilisateur, vous pouvez également accéder à un ensemble d'utilitaires de base grâce à l'interface de programmation d'application CHEMKIN (CHEMKIN / API), ce qui facilite la construction habituelle, les applications CHEMKIN par C / C ++ ou de programmation Fortran. De cette façon, les produits CHEMKIN offrent une large capacité qui répond aux besoins des non-experts et les utilisateurs experts.

Réacteur Modèles CHEMKIN-PRO sont emballés pour l'aligner sur les besoins des spécifiques des industries. Un résumé des domaines d'application visés par CHEMKIN-PRO est donné dans le Tableau III.1, avec une brève description de chacun des composants du réacteur type :

Icône	réacteur Modèle Composant	La description
	Inlet Source	Source externe pour le gaz d'entrée
	Initialisation	La source externe d'initialisation
	Sortie	flux de sortie (produit) de réacteur-pas encore traitée dans thismodel.
	Mélangeur de gaz	mélangeur de gaz non-réactif, qui accepte des entrées multiples.
	Débit Splitter Gaz	Splits flux en plusieurs flux
	Équilibrisme	chimiques et l'équilibre des phases de calculs
	Analyseur de mécanisme	outil d'analyse du mécanisme, pour l'analyse thermochimique, le transport, et les données cinétiques inclus dans un ensemble de chimie.
	Moteur multi-zone	Fermée, homogène, modèle de moteur à combustion interne multizone qui permet de définir un certain nombre de zones à l'intérieur du cylindre du moteur pour tenir compte de la stratification de température et de composition, pour la prévision des émissions et de calage d'allumage
	IC Engine	Fermé, études homogène simulateur de moteur à combustion, interne, dans le cylindre à allumage par compression.
	Réacteur Homogène fermé	système transitoire, fermé, homogène ou réacteur discontinu.
	Fermé Reactor partiellement Brassé (Closed PAST) Transitoire, fermé, partiellement agité ou un réacteur non-mixte, qui détermine les limites de taux entre le mélange et la cinétique.	

	Fermé Réacteur Plasma:	Transitoire, fermé réacteur à plasma, bien mélangé.
	Réacteur parfaitement agité (PSR)	Transitoire ou état stable parfaitement agité réacteur, également connu réacteur à réservoir agité en continu comme (CSTR).
	Plasma Reactor Brassé (PSR Plasma)	Transitoire ou état stable réacteur à plasma bien mélangé
	Réacteur partiellement Brassé (PAST)	Ouvert partiellement agité ou un réacteur non mixte pour déterminer les limites de taux entre le mélange, la cinétique, et le débit.
	Plug-débit du réacteur (PFR)	réacteur Plug-débit, où la convection domine le transport Plasma Plug-réacteur à flux: réacteur à plasma dans des conditions Plug-débit.
	Planar écoulement de cisaillement	réacteur Shear-flow, qui tient compte des effets de la couche limite dans chaînes planes
	Cylindrique écoulement de cisaillement	réacteur Shear-flow, qui tient compte des effets de la couche limite dans canaux cylindriques
	Honeycomb Monolithe	Plug-débit réacteur catalytique à lit fixe avec une surface interne définie par des propriétés en nid d'abeille et le chargement de catalyseur.
	Brûleur pré-mélangé	1-dimensions, laminaire, flamme du brûleur stabilisé, pré-mélangée.
	Flamme Calculator Vitesse	1-dimensionnel propagation de la flamme librement pour pré mélange déterminant, laminaire flamme vitesses

		Flamme Contrée-flow
	Flamme Contrée-flow	Diffusion ou d'une flamme opposée flux pré-mélangé.
	Stagnation Débit	stagnation d'écoulement en régime permanent transitoire ou (douche-tête) dépôt chimique en phase vapeur (CVD) ou dépôt de couches atomiques (ALD) réacteur.
	Disque rotatif	Transitoire ou état stable, la stagnation d'écoulement (douche-tête) dépôt chimique en phase vapeur (CVD) ou dépôt de couches atomiques (ALD) réacteur avec un disque rotatif
	Incident choc	choc incident normal, utilisé pour simuler des expériences de choc à tubes.
	Shock Réfléchie	Normale reflète le choc, utilisé pour simuler des expériences de choc à tubes.
	PECVD analyseur thermique	Thermal module d'analyse pour basse pression, le dépôt chimique en phase vapeur (PECVD) les réacteurs du four de traitement par lots, ce qui détermine le plan de la température en 2-D dans un réacteur de four étant donné la pile de plaquettes, l'enceinte de quartz et radiants.
	Four LPCVD	modèle de réacteur multi-tranche servant à déterminer l'uniformité de dépôt d'un champ de température donnée dans un procédé de dépôt chimique en phase vapeur basse pression (LPCVD) réacteur à four discontinu.

Tableau III-1 : Description des Modèles de réacteurs dans CHEMKIN-PRO.

III.4.1-Loi d'Arrhenius

En cinétique chimique, la **loi d'Arrhenius** permet de décrire la variation de la vitesse d'une réaction chimique en fonction de la température. Cette loi a été énoncée par Svante August Arrhenius en 1889 dans son article intitulé « On the reaction velocity of the inversion of cane sugar by acids ». Mais ce n'est que vers 1910 qu'elle a été universellement acceptée par les chimistes de son temps. En effet, la loi d'Arrhenius a pu être vérifiée expérimentalement pour un grand nombre de réactions chimiques. Toutefois, toutes les réactions ne suivent pas cette loi (en particulier les réactions enzymatiques).

La loi d'Arrhenius est donc une loi empirique, ce qui signifie qu'elle est basée sur des résultats observés expérimentalement dans un grand nombre de cas. Elle a pris par la suite une grande importance théorique car elle est compatible avec la théorie des collisions et celle du complexe activé d'Eyring et Polanyi en 1935.

Est défini comme suivant :

$$K=A\,T^{n}\exp(-E/RT).$$

- k, coefficient de vitesse (ou constante de vitesse) ;
- T, température en K (kelvin) ;
- R, constante des gaz parfaits (valeur usuelle $R = 8{,}314\ J\cdot K^{-1}\cdot mol^{-1}$; valeur précise $R = 8{,}314472\ Pa\cdot m^{3}\cdot K^{-1}\cdot mol^{-1}$ recommandée par Codata).
- E, énergie d'activation d'Arrhenius donnée en $J\cdot mol^{-1}$ (joule par mole).

III.4.2 Zone de travail

La zone de travail de l'environnement CHEMKIN-PRO est l'endroit où la vue Diagramme est affichée pour le modèle constructeur, et aussi où les paramètres qui définissent la géométrie et la chimie d'un modèle de réacteur peuvent être entrés dans les panneaux. User-préférences et paramètre-profils sont également modifiés dans la zone de travail.

Il y a six étapes de base impliquées dans l'utilisation de CHEMKIN-PRO pour résoudre un produit chimique typique problème de modélisation d'un processus. Selon le réacteur Modèle CHEMKIN-PRO particulier sélectionné, une partie de l'entrée ne sera pas tenu pour un problème particulier ; ceux-ci sont indiqués entre parenthèses.

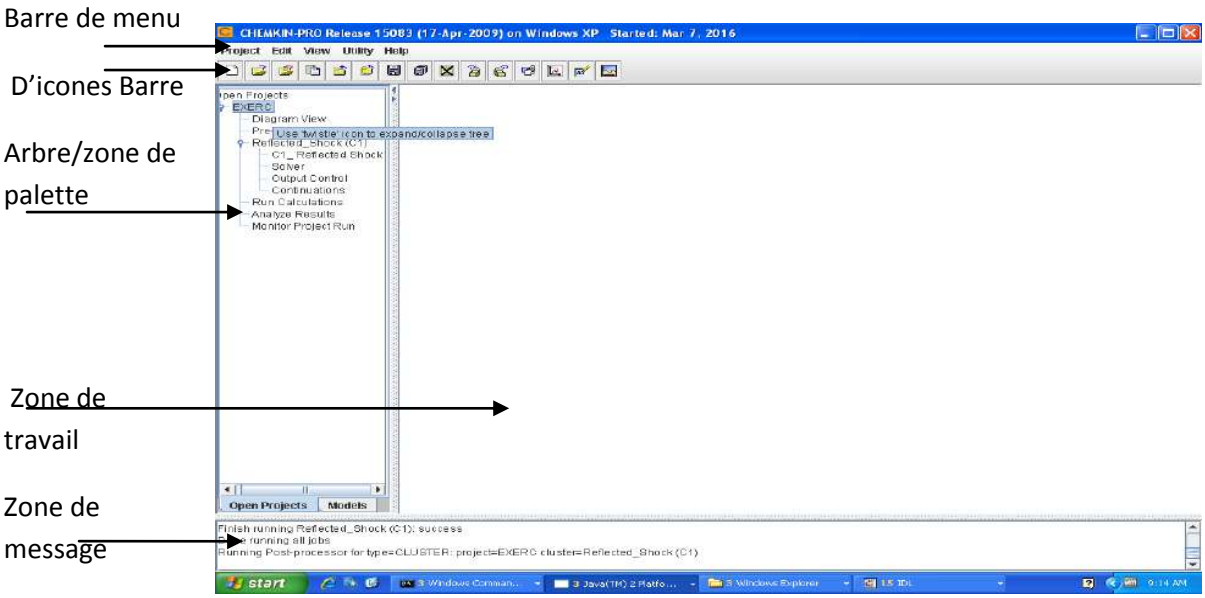
Dans une étude, on suit les étapes suivantes :

• La barre de menus : située en haut de l'écran, dispose de cinq menus : ***Projet, Modifier, Voir, Utilitaire et Aide***. Ceux-ci permettent à l'utilisateur d'accéder à une variété d'options, décrite plus en détail ci-dessous.

• La barre d'icônes : située directement sous la barre de menu, permet un alternatif moyen d'accéder à des options du programme.

• La zone Arbre / Palette : située sur le côté gauche de l'écran, comporte deux onglets :

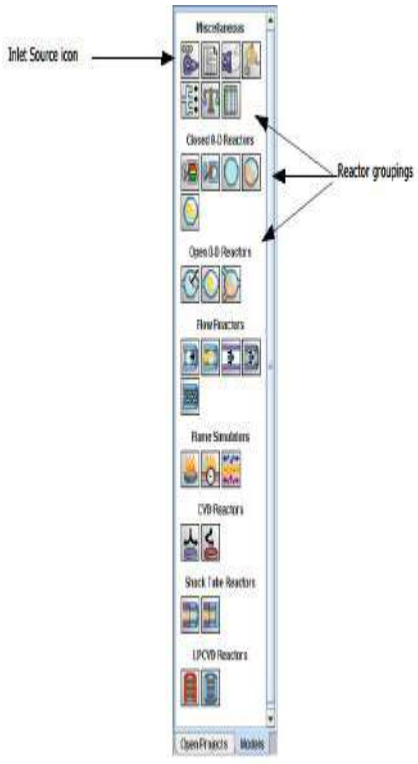
Ouvrir Arbre Projets et Palette de modèles. L'onglet **Projets Open** montre les nœuds de l'arborescence du projet en cours, dont chacun fournit un lien vers les panneaux pour l'utilisateur en contribution. À travers les nœuds de l'arborescence, l'entrée d'utilisateur est classée comme niveau de grappe, niveau du réacteur,, les paramètres liés solveur, paramètres de sortie spécifiques d'entrée ,gestion des continuations, et de l'emploi (run) et contrôle. Les contrôles d'exécution comprennent Calculs Run, Run étude des paramètres, l'analyse des incertitudes Run, et Panneaux de surveillance. La vue Diagramme est également accessible via l'Open Project arbre. L'onglet Modèles fournit une "palette" de modèles de réacteurs et est utilisé pour construire une définition du projet en termes de réacteur et d'entrée dans la connectivité Diagramme.



Figure(III.1) : Zone de travail

III.4.3Menu et barres d'icônes

Les menus, Projet, Edition, Affichage, utilitaire et Aide, situé dans la barre de menu, permettent d'accéder à une variété d'options. Les tableaux 2-1 à 2-5 présentent une brève description de chacun des éléments de menu et l'icône correspondante dans la barre d'icônes qui peuvent également être utilisé comme une alternative pour accéder à l'option.



III.4.4 Arbre / Palette Voir

Les deux onglets dans la vue Arbre / Palette permettent d'accéder à l'arborescence panneau entrée comme ainsi que le réacteur modèle palette pour la construction de la définition du projet.

III.4.1 Modèles Tab

L'onglet Modèles présente une "palette" d'icônes réacteur de modèle. Ces icônes sont utilisées pour mettre en place le schéma de réacteur pour le projet. L'onglet Modèles est utilisé en conjonction avec la vue Diagramme, qui peut être accessible à partir de l'onglet Projets ouverts. Une fois qu'un projet est ouvert, l'utilisateur peut insérer les

icônes dans la vue Diagramme, soit cliquant sur les ou en les faisant glisser avec la souris. Une série de simulations en tandem ou un réseau de réacteurs peut être construit en reliant les icônes du réacteur ensemble. Cela se fait par maintenant la gauche de la souris bouton Shift + pour dessiner les connexions. Le modèle Palette est illustrée à la figure. Une description de chaque du modèle de réacteur composants est donnée dans le tableau III-1.

III.5 Les propriétés des éléments principaux :

1-carbone : ci élément combustible principale est représenta (60% à 80%) dans la masse totale de combustible, bien dégage un charge. quantité de chaleur 8100Kcal/Kg.

2-Hydrogène : ci on si un élément combustible principale mais sa représentation dans combustible est fable (3% à 4%) de combustible solide, et (8%à12%) de combustible liquide. On bien dégage trié grand quantité de chaleur 3400Kcal/Kg.

3- oxygène : Troisième élément le plus fréquent dans l'univers, l'oxygène est l'un des pierres angulaires du vivant et forme des composés avec presque tout l'autre élément.

L'argon : est produit industriellement par la distillation fractionnée de l'air liquide. Argon est surtout utilisé comme gaz de protection inerte en soudage et d'autres procédés industriels à haute température où des substances ordinairement réactives deviennent réactifs; par exemple, une atmosphère d'argon est utilisée dans des fours électriques de graphite pour empêcher le graphite de la combustion. Gaz Argon à également des utilisations en incandescence et un éclairage fluorescent, et d'autres types de tubes à décharge de gaz. Argon fait un laser à gaz bleu-vert distinctif. L'argon est également utilisé dans les starters à lueur fluorescente.

4-azote : c'est un gaz inerte (qui ne parti ci pas on réaction) on perle le combustible liquide. L'azote qui devant un gaz de fîmes ce teneure est de l'ordre 1%à 2%.

5- Le méthane : est le composant principal du gaz naturel. Il peut être transformé en gaz de synthèse (H2 + CO) par la réaction d'oxydation partielle (POM). L'objectif principal de ce travail est de comprendre le mécanisme cinétique de la réaction de POM en présence d'un catalyseur. La réaction est effectuée dans deux différents types de réacteurs: un réacteur parfaitement agité à jet où à la fois en phase gazeuse et les réactions de surface peuvent être étudiés simultanément et un réacteur à lit fixe. Dans une première partie, l'oxyde de lanthane La2O3 est utilisé comme catalyseur. De comparaisons entre les données expérimentales et simulées (Chemkin / CHEMKIN Surface), un mécanisme d'hétéro-homogène ayant la

capacité d'expliquer les observations expérimentales est proposé. Dans une deuxième partie, les efforts se sont concentrés sur deux catalyseurs à base de nickel (Ni / La2O3 et Ni / CeO2) qui présentent une bonne activité et stable. La discussion sur les performances catalytiques a été faite sur la base des observations expérimentales et caractérisations de catalyseur.

La réaction complète du méthane dans l'air s'écrit :

$$CH4 + 2\ (O2 + 3.76\ N2) \longrightarrow CO2 + 2\ H2O + (3.76 * 2\ N2)$$

Dont la chaleur de réaction vaut d'après les enthalpies de formation à 300 K : - 191 kcal /mole de CH4.

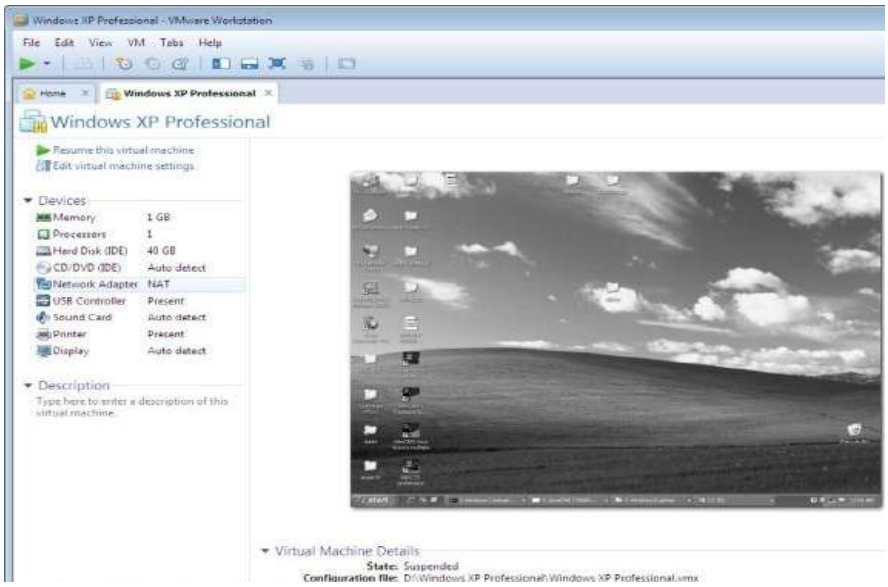
III.6 Présentation de CHEMKIN:

1 : Problème *:* définition le programme de CHEKIN avec exemple simple.

Etape 1 : Lancez CHEMKIN-PRO.

• Pour Windows / PC, le programme d'installation aura placé une icône intitulée

CHEMKIN-PRO sur votre bureau. Double-cliquez sur l'icône CHEMKIN-PRO pour lancer le programme. Vous pouvez également accéder à CHEMKIN-PRO de la **Démarrer> Tous Programmes> Réaction Design> CHEMKIN-PRO> CHEMKIN-PRO** menu option.



Figure(III.2) : Sélectionnée fenêtre de chemkin PRO

Etape2:

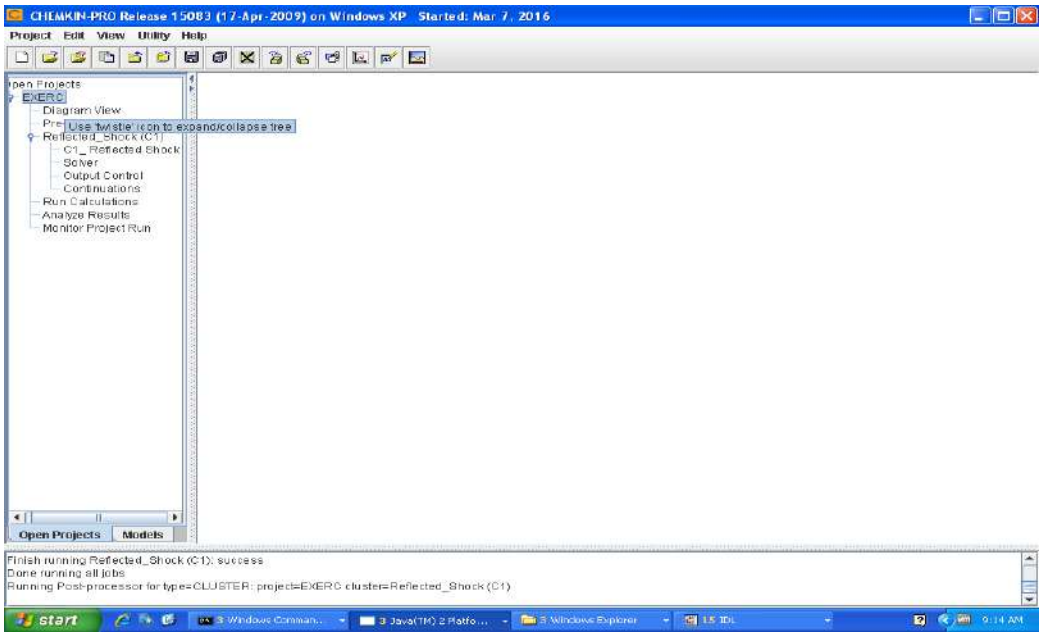


Figure (III.3) : Zone de travail

Etape 3: click sur **Shock Réfléchie, et nommé « EXERC », on click sur Update**

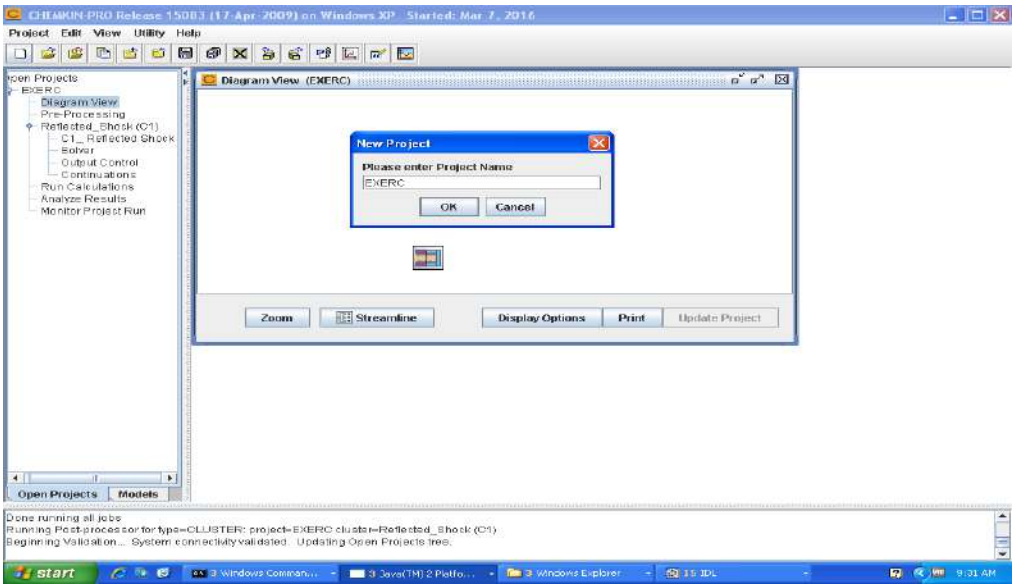


Figure (III.4) : fenêtre de diagrame View.

Etape4 : Double-cliquez sur **Pre-Processing** sur l'arbre des projets ouverts. Un panneau similaire à la devrait apparaître.

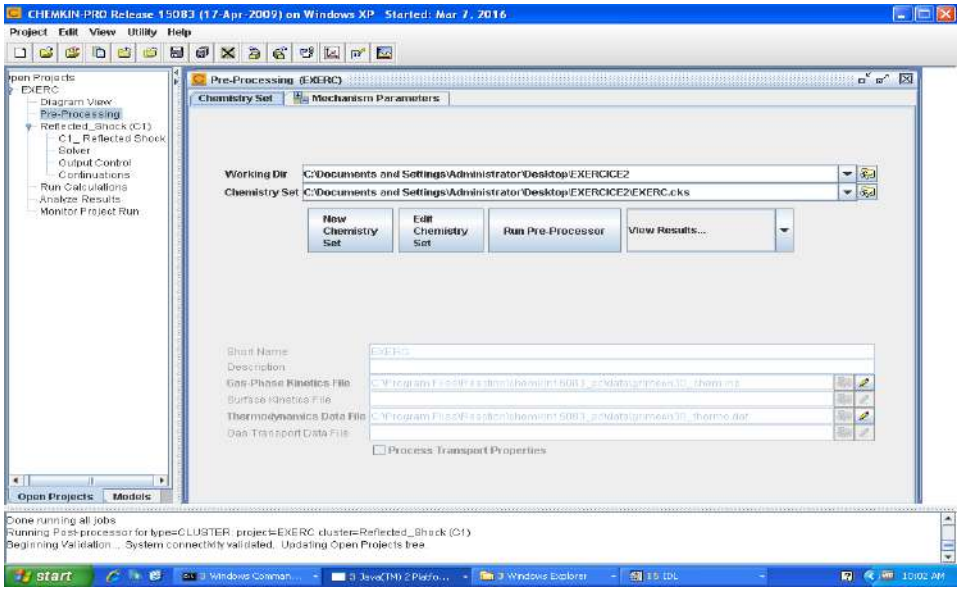


Figure (III.5) : fenêtre de pre-processing chemistry set.

Etape5 : Double-cliquez sur Reflected-Shock(C1).

Etape5/1 : Et double-cliquez sur (C1) Reflected Shock et d'entrée la propriété physique (t=0.01sec, t=1600K et P=1 atm.)

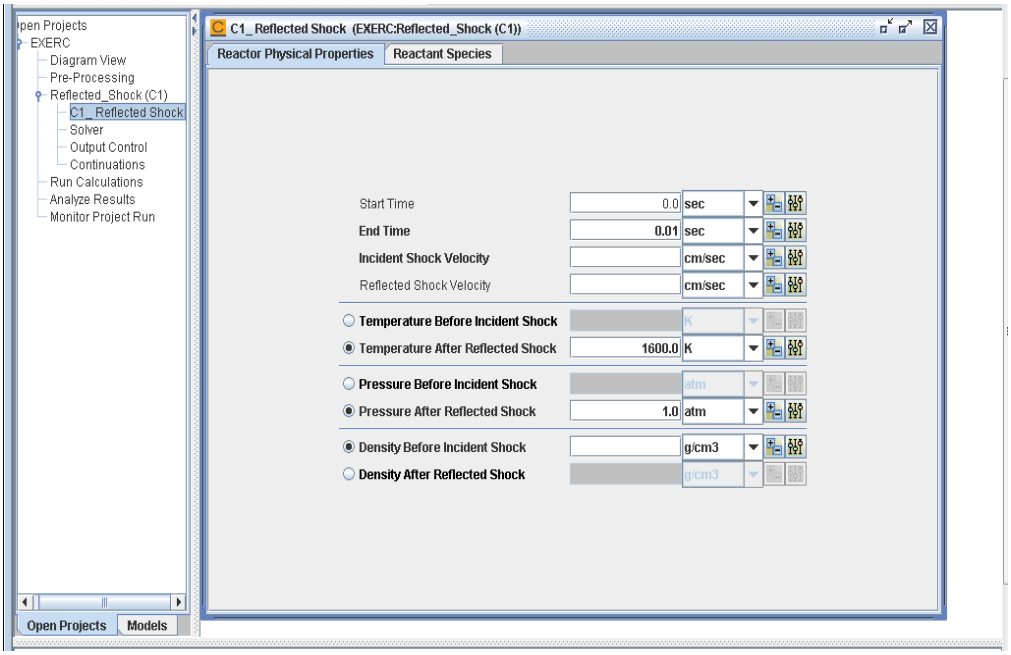


Figure (III.6) : fenêtre de propriété physique.

Etape5/2 : click sur **Réactant Species** et entrée les valeurs initial de « Rectant Fraction »

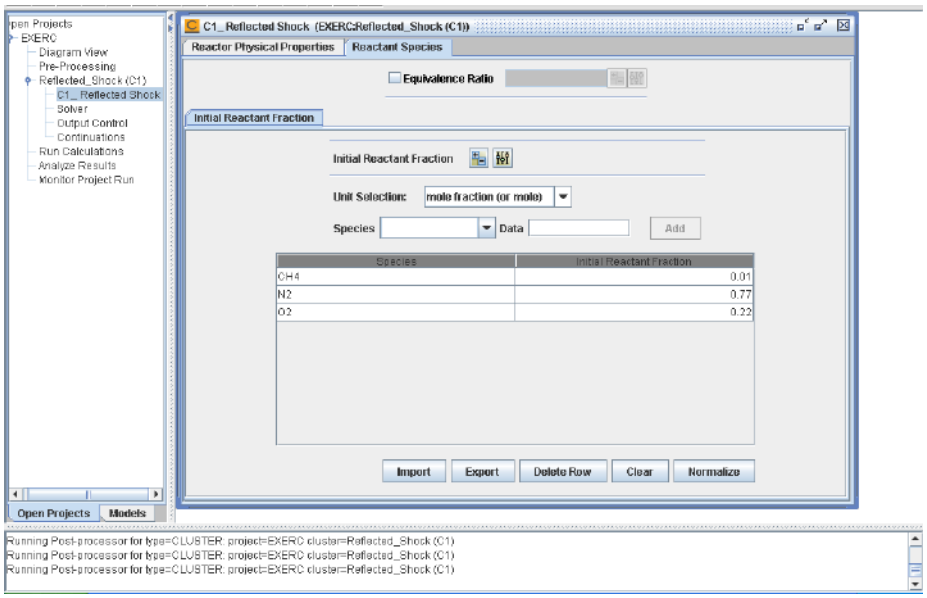


Figure (III.7) : fenêtre de Rectant Fraction.

Etape 6 : Double-cliquez sur le nœud Calculs sur Exécuter dans l'arborescence des projets ouverts. Un petit panneau semblable à celle de la doit apparaître devant le diagramme.

Etape6/1 : Click sur Begin

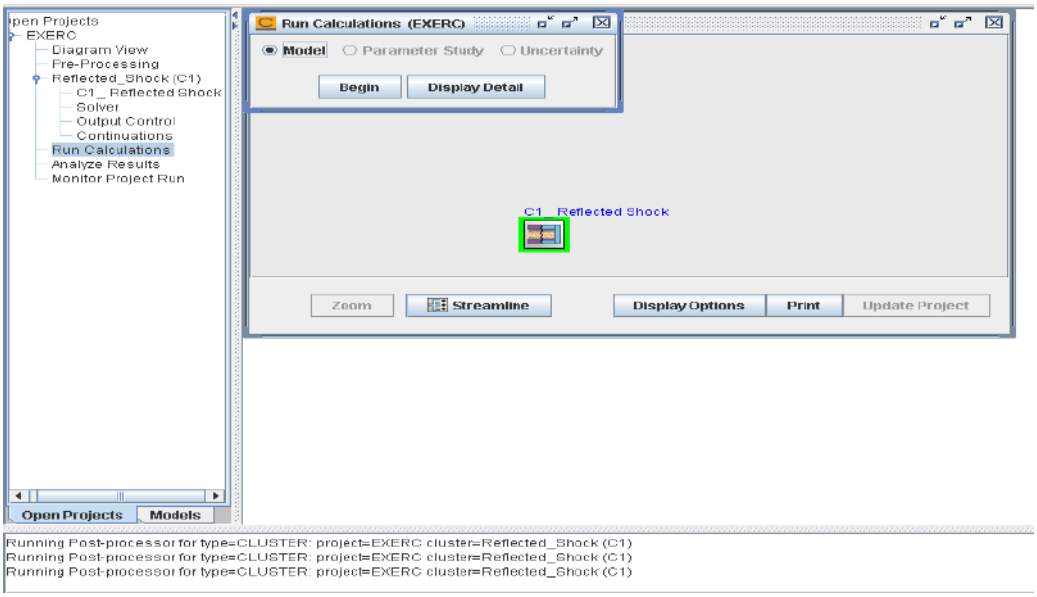


Figure (III.8) : fenêtre Run calculation-de Begin.

Etape6/2 : click on **next step**

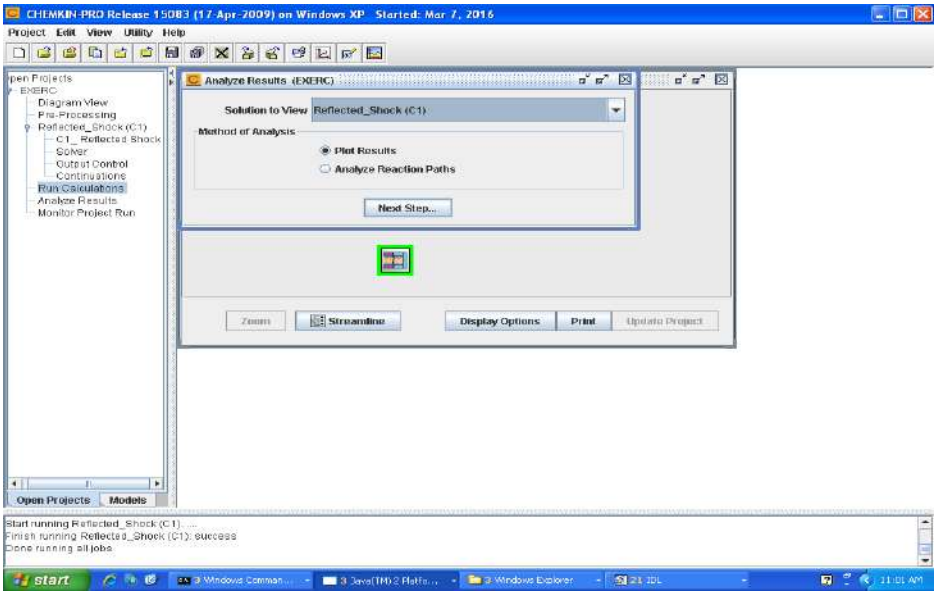


Figure (III.9) : fenêtre Run calculation-next step.

Etape6/3 : click sur **Process Soulution Data.**

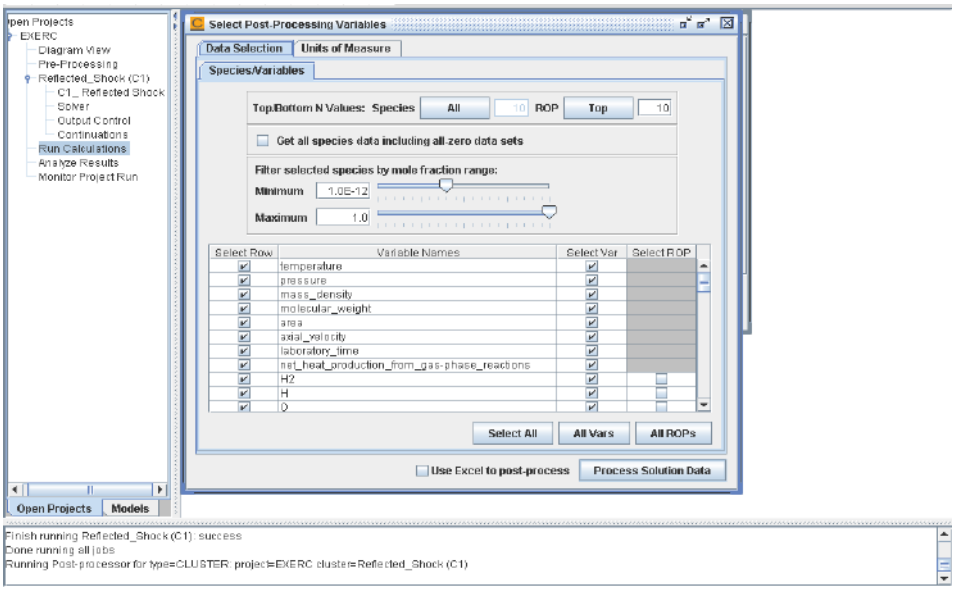
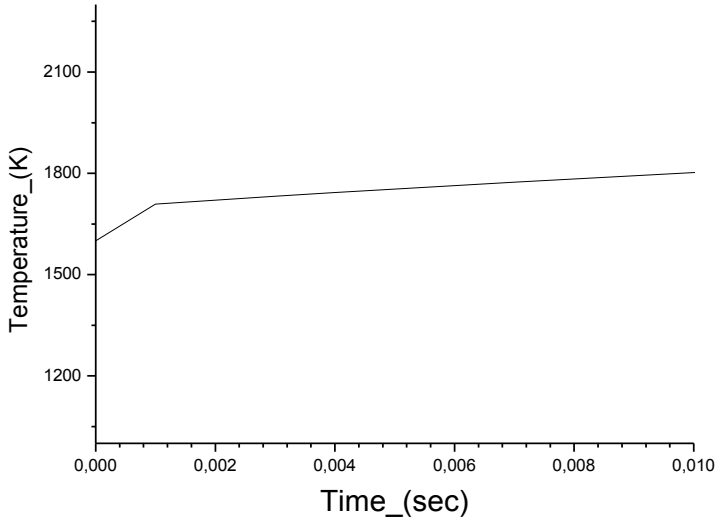


Figure (III.10) : fenêtre Run calculation- Process Soulution Data.

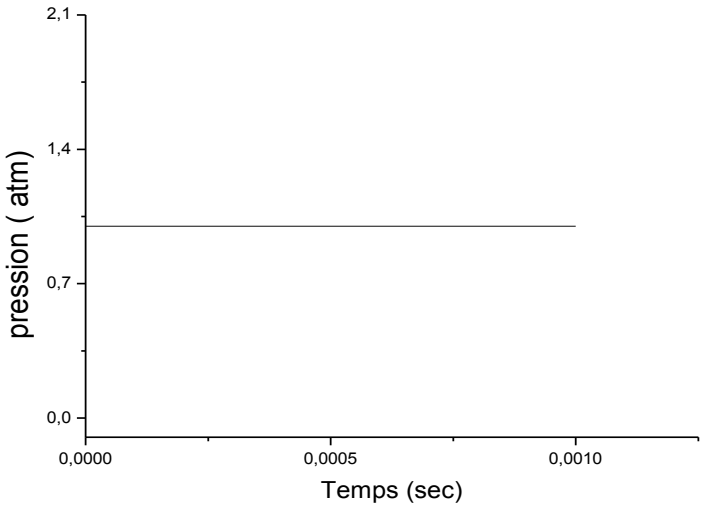
III.7 Tracées les graphes : la température, La pression ; mole Fraction en fonction de Temps.



Figure(III.11): La Température on fonction de Temps

Remarque :

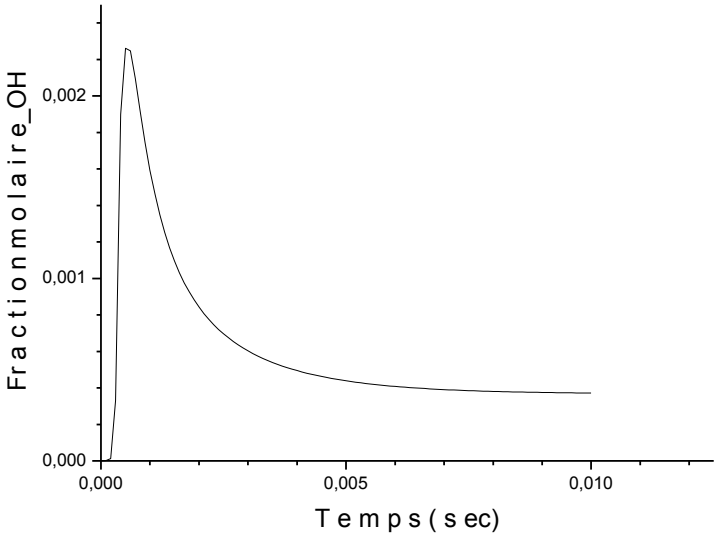
On remarque que une augmentation de la température linières jusqu'à 0.001 sec, pour de température1750K, puis après de temps 0.001sec la température est progressivement jusqu'à1800k.



Figure(III.12): pression on fonction de Temps

Remarque

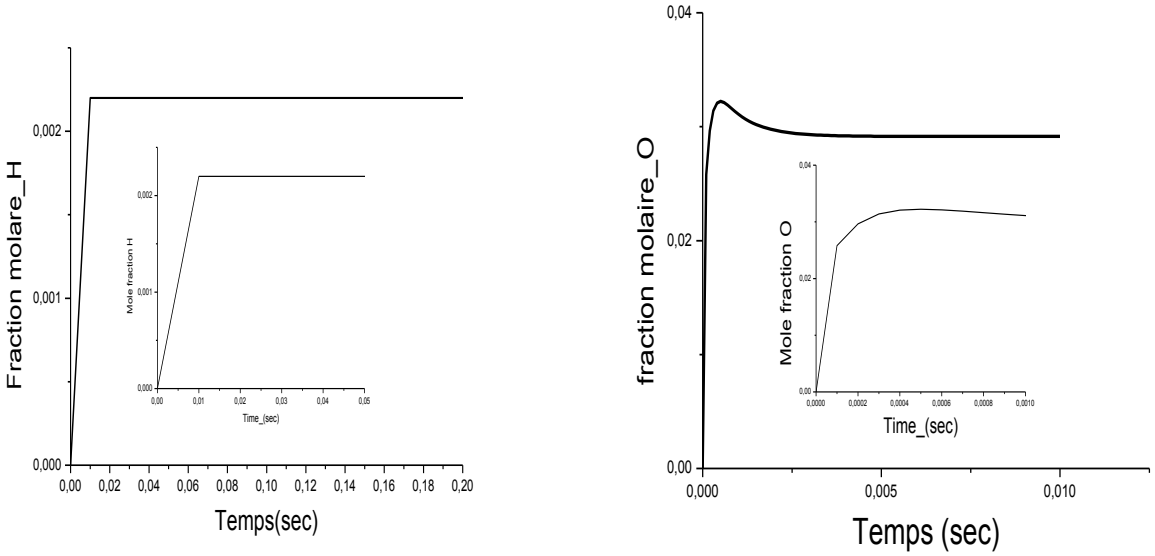
On remarque que le profile de pression est constant parce qu'elle la pression isobare.



Figure(III.13): Fraction molaire OH on fonction de Temps

Remarque :

Pour t= [0.00 à0.01] sec, le profile de fraction OH molaire est augmenté jusqu'à la valeur maximal 0.0022 .Pour t= [0.01 à 0.04] sec, on remarque diminution de fraction molaire progressivement, puis raster constant.

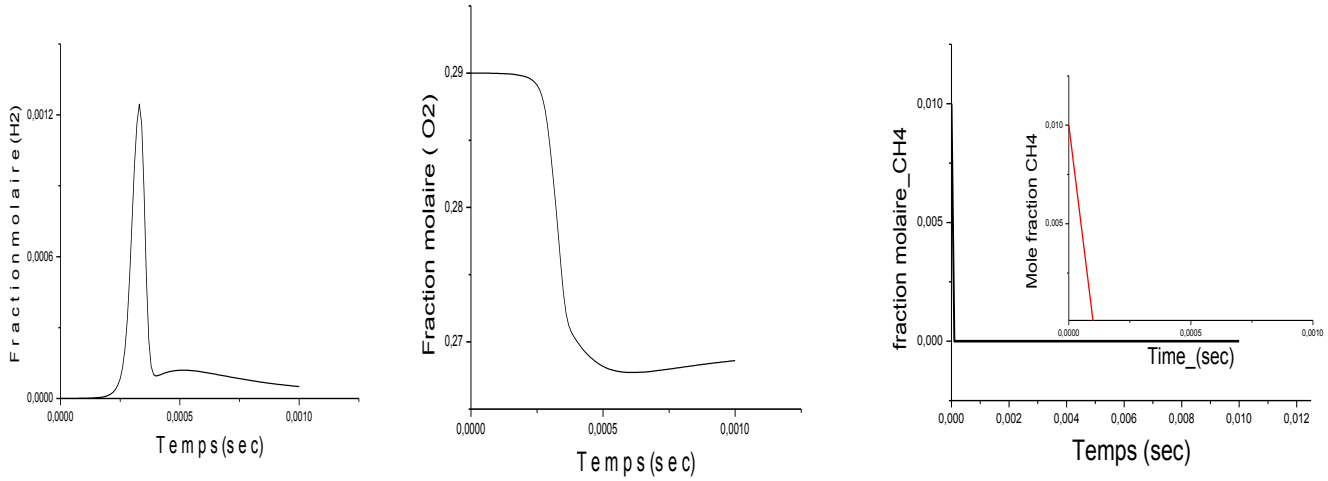


Figure(III.14) : la variation de fraction molaire O et H

Les figure représenté les variations des fractions molaire on fonction de temps.

On remarque qu'augmentation de profil de fraction molaire O et H et puis constant.

Puisque il s y un produit de réaction chimique.



Figure(III.15) : les variations de fraction molaire H2, O2 et CH4.

Concluions :

Dan ce chapitre et défini les touts propriété et les éléments de programme de code CHEMKIN .et autre chapitre et étude de la stabilisation des flammes dans ce programme.

IV.1 Introduction :

L'objectif de ce chapitre est de présenter l'étude de deux problèmes à l'aide du code CHEMKIN, à savoir : Reflected-Shock et Pre-mixed-Burner.

IV.2 Définition :

Quand une onde de choc voyageant dans un milieu, elle frappe l'interface entre ce milieu et un milieu plus dense. Une partie de l'énergie de l'onde de choc induite par une onde de choc dans le milieu plus dense et le reste de l'énergie participe à la formation d'une onde de choc réfléchie qui se déplace à travers le milieu moins dense.

IV.2.1 Conditions initiales du modèle Reflected-Shock :

-Time=1sec

- La température parère flected-shock =3000k

-La pression après Reflected-Shock=1atm

IV.3 Problème du Projet:

cas1 : entrée de l'oxygène(O2)

-les éléments : O, H, AR

- 19 reactions

cas2 : entrée de l'air

- les éléments : O, H, AR, N

- 60 réactions

Problém1 :on étudie la structure de la flamme des deux cas cités ci-dessus à l'aide du modèle Reflected-Shock intégré dans CHIMKIN.

IV.3.1- Cas de l'oxygène :

IV.3.1.1- Présentation :

Etape1 :

- Crier un fiche et nommée**cas1**, et ouvrir bloc-notes pour registrer le fichier.
- Ecrire la **réaction chimique** sur le bloc-notes comme montré ci-dessous :

```
ELEMENTS
O  H AR
END
!
SPECIES
H2 O2 HO2 H OH O H2O H2O2 AR
END
REACTIONS

H2+O2=HO2+H          7.00E+13          0          56800
H+O2=OH+O            2.20E+14          0          16800
O+H2=OH+H            5.06E+04          2.67        6290
OH+H2=H2O+H          2.66E+08          1.51        3430
OH+OH=H2O+O          1.50E+09          1.14           0
H+OH+M=H2O+M         8.62E+21         -2.0            0
H+H+M=H2+M           7.30E+17         -1.0            0
H+O+M=OH+M           2.60E+16         -0.6            0
O+O+M=O2+M           1.10E+17         -1.0            0
H+O2+M=HO2+M         2.30E+18         -1.0            0
HO2+H=OH+OH          1.50E+14          0           1000
HO2+O=O2+OH          2.00E+13          0              0
HO2+OH=H2O+O2        2.00E+13          0              0
HO2+HO2=H2O2+O2      2.00E+12          0              0
H+H2O2=H2+HO2        1.70E+12          0           3780
H+H2O2=OH+H2O        1.00E+13          0           3580
O+H2O2=OH+HO2        2.80E+13          0           6400
OH+H2O2=H2O+HO2      7.00E+12          0           1435
OH+OH+M=H2O2+M       1.60E+22          -2.2           0

END
```

- Ouvrir un autre bloc-notes et entrer les **propriétés thermodynamique.**

Thermo - Bloc-notes

Fichier Edition Format Affichage ?

```
THERMO
   300.000  1000.000  5000.000
O                 L 1/90O   1             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-1.00177799E-11 1.22833691E-15    2
 2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-3.27931884E-03 6.64306396E-06    3
-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04 2.05193346E+00                   4
O2                TPIS89O   2             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07 2.09470555E-10-2.16717794E-14    2
-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-2.99673416E-03 9.84730201E-06    3
-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00                   4
H                 L 7/88H   1             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-4.73515235E-18 4.98197357E-22    2
 2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00 7.05332819E-13-1.99591964E-15    3
 2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-4.46682853E-01                   4
H2                TPIS78H   2             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.33727920E+00-4.94024731E-05 4.99456778E-07-1.79566394E-10 2.00255376E-14    2
-9.50158922E+02-3.20502331E+00 2.34433112E+00 7.98052075E-03-1.94781510E-05    3
 2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E+02 6.83010238E-01                   4
OH                RUS 78O   1H  1           G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.09288767E+00 5.48429716E-04 1.26505228E-07-8.79461556E-11 1.17412376E-14    2
 3.85865700E+03 4.47669610E+00 3.99201543E+00-2.40131752E-03 4.61793841E-06    3
-3.88113333E-09 1.36411470E-12 3.61508056E+03-1.03925458E-01                   4
H2O               L 8/89H   2O  1           G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.03399249E+00 2.17691804E-03-1.64072518E-07-9.70419870E-11 1.68200992E-14    2
-3.00042971E+04 4.96677010E+00 4.19864056E+00-2.03643410E-03 6.52040211E-06    3
-5.48797062E-09 1.77197817E-12-3.02937267E+04-8.49032208E-01                   4
HO2               L 5/89H   1O  2           G   200.000  3500.000  1000.000    1
 4.01721090E+00 2.23982013E-03-6.33658150E-07 1.14246370E-10-1.07908535E-14    2
 1.11856713E+02 3.78510215E+00 4.30179801E+00-4.74912051E-03 2.11582891E-05    3
-2.42763894E-08 9.29225124E-12 2.94808040E+02 3.71666245E+00                   4
H2O2              L 7/88H   2O  2           G   200.000  3500.000  1000.000    1
 4.16500285E+00 4.90831694E-03-1.90139225E-06 3.71185986E-10-2.87908305E-14    2
-1.78617877E+04 2.91615662E+00 4.27611269E+00-5.42822417E-04 1.67335701E-05    3
-2.15770813E-08 8.62454363E-12-1.77025821E+04 3.43505074E+00                   4
AR                120186AR  1             G   300.000  5000.000  1000.000    1
 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.07453750E+04 0.04366000E+02 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.07453750E+04 0.04366000E+02                   4

AR                120186AR  1             G   300.000  5000.000  1000.000    1
 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.07453750E+04 0.04366000E+02 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.07453750E+04 0.04366000E+02                   4
END
```

On enregistre ce fichier dans le répertoire de travail approprié qui sera lu par le code C**hemkin**

Etape2 : Lancez CHEMKIN-PRO et Click sur CHEMKIN-PRO Release 15083.



Figure (IV.1) : Fenêtre sélection de CHEMKIN-PRO

Etape3 : - click sur projet est choisie close all. Créer novelle est nommée« reflectede-shock ».

- click sur model et choisir {Normal reflected-shock} puis click sur update Project

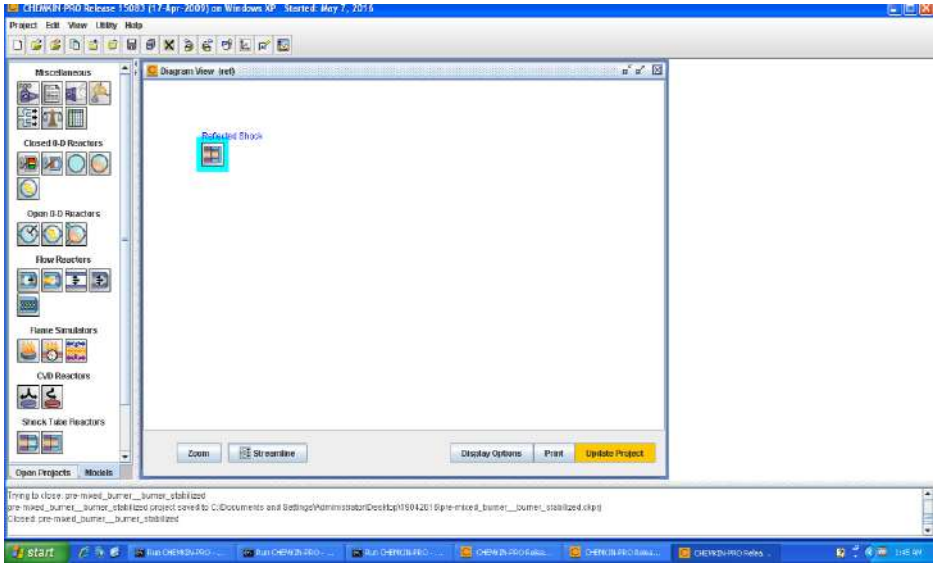


Figure (IV.2) : Menu de lancement d'un cas de reflected-shock

Etape4 : double click sur pré-processing et click :

1- new chemistry set pour entrer les données suivantes :

- Gaz-phase kinetics File :
  C:\Documents and Settings\Administrator\EXERCICE\Files of type All Fill\reaction.txt.
- Thermodynamique : C:\Thermo.txt
  - Save as, et choisir « EXERCICE»
  -Save

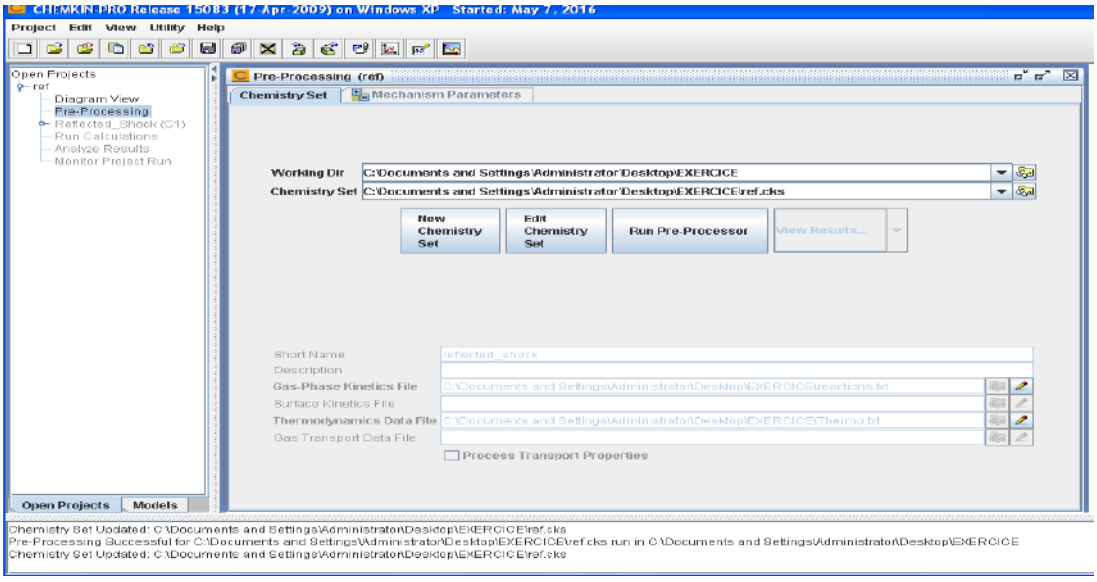


Figure (IV.3): Fenêtre de chemistry set

2- Edit **chemistry** set: Click sur Save

3- Run pré-processor et active View result.

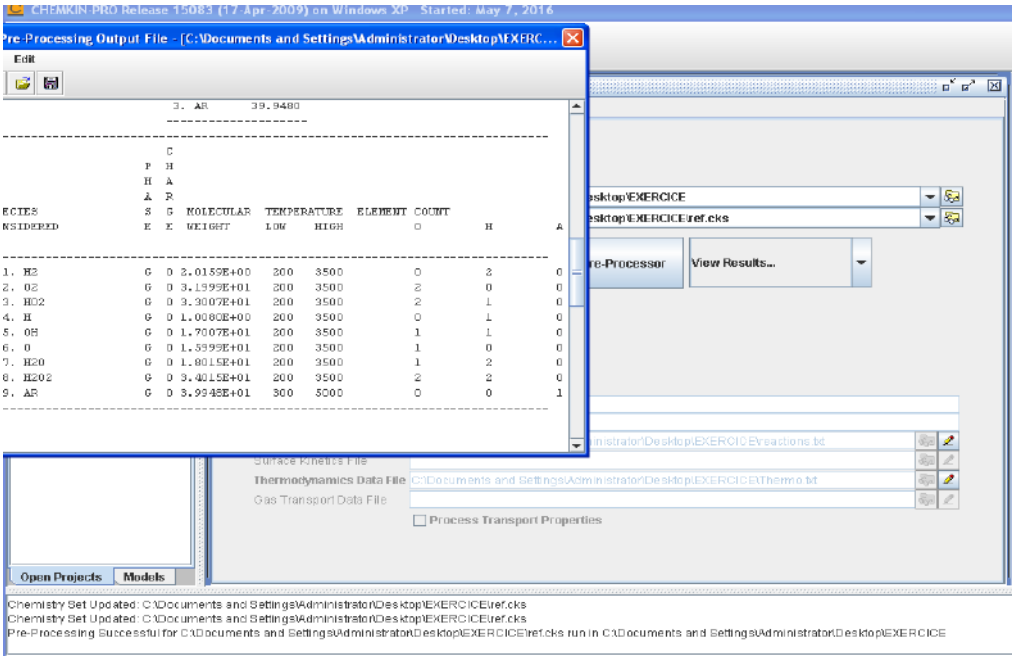


Figure (IV.4): Fenêtre de View result.

Etape5: Double click sur reflected-shock (C1) et Click sur :

1-C1-reflected-shock et entre les propriétés suivantes :

- les propriétés physiques : Temps=1sec, Température=3000k et pression=1atm.

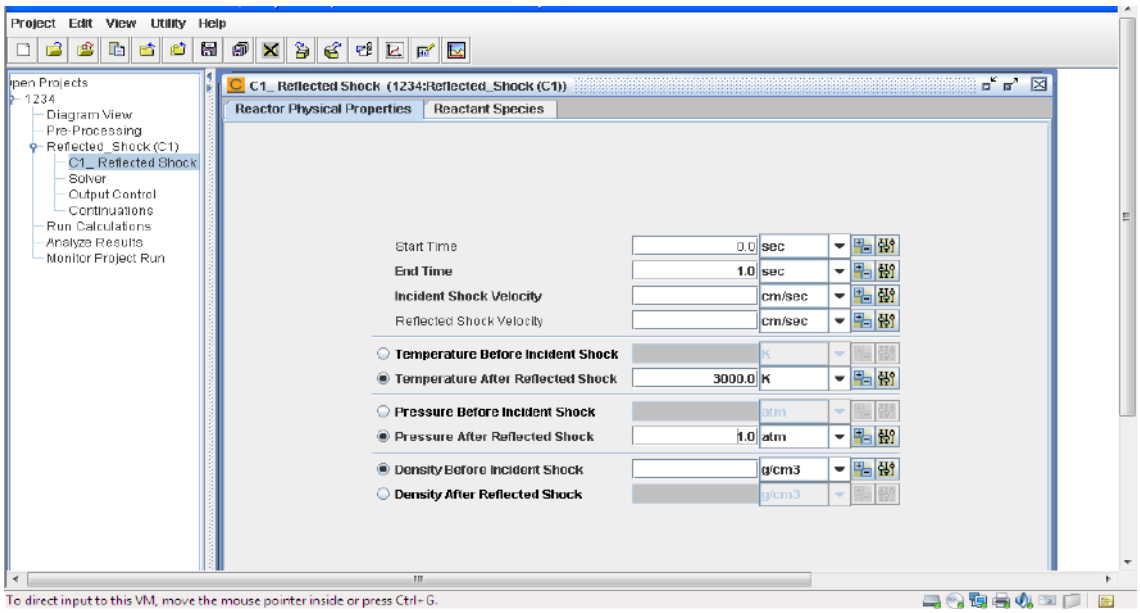


Figure (IV.5) : Fenêtre de propriétés physiques

- Les Espèces Réactives (Reactant species) : Hydrogène(H2) =0.28, Oxygène(O2)= 0.09 et argum (AR) =0.63.

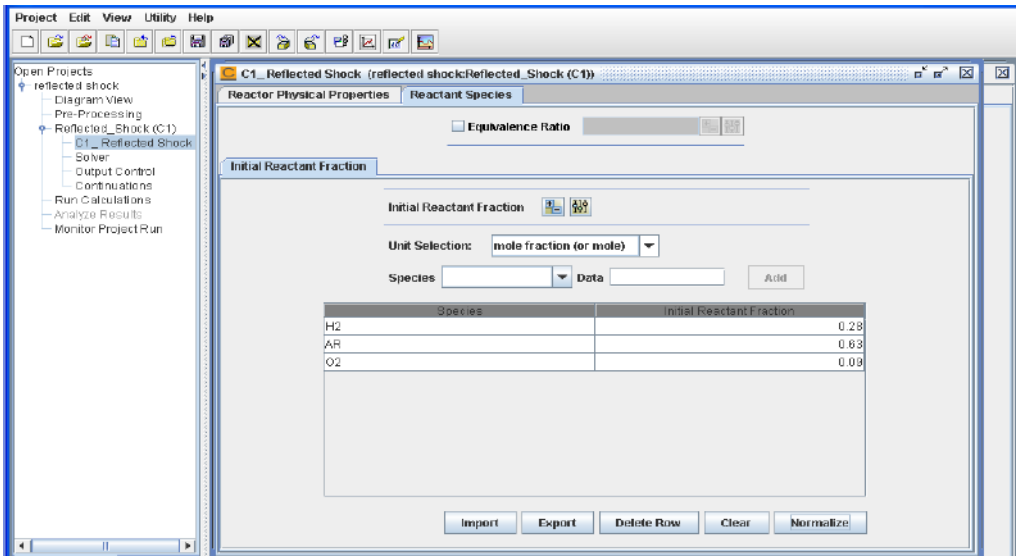


Figure (IV.6) : Fenêtre de Reactant species

Etape6:

Double click sur Run calculation – Begin – Next step –process solution Data

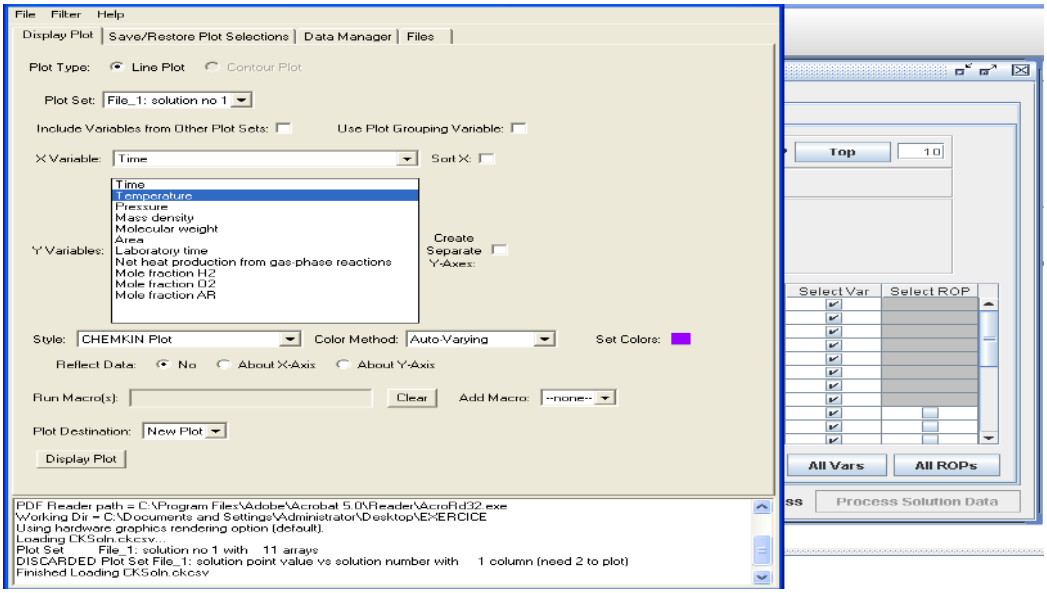
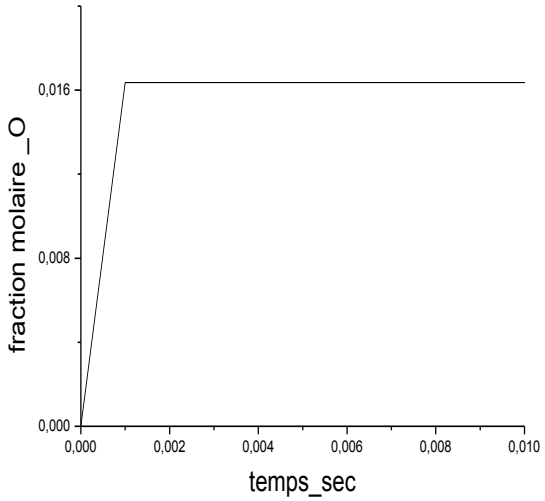
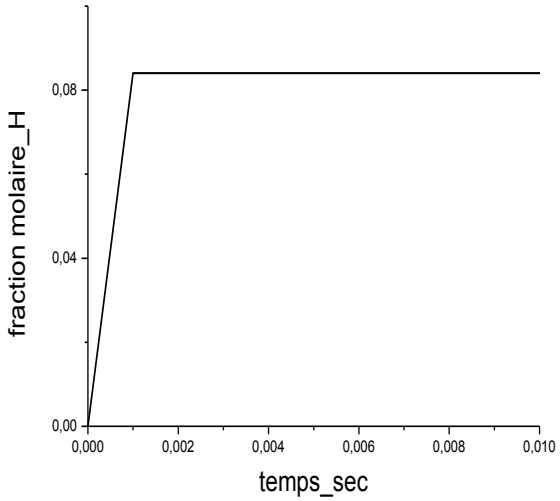


Figure (IV.7) : Fenêtre de calcul

IV.3.4 Courbes d'évolution du cas de la combustion avec O2 :

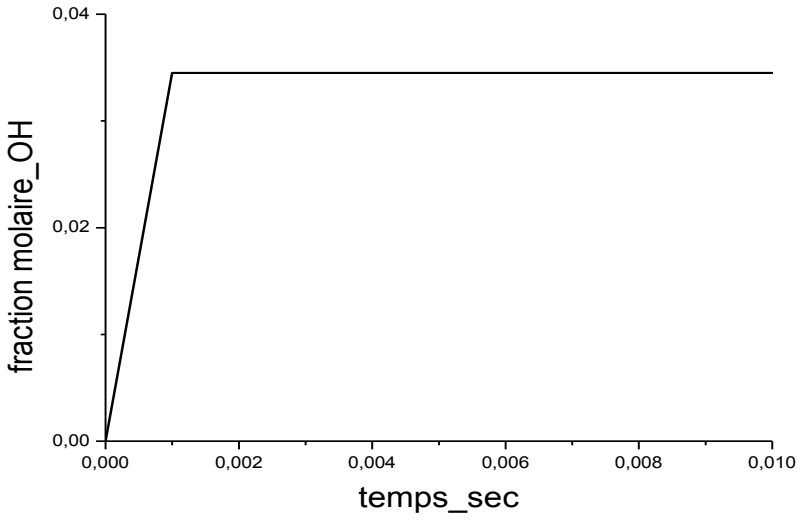


Figure(IV.8) : Fraction molaire **O** en fonction du **Temps**



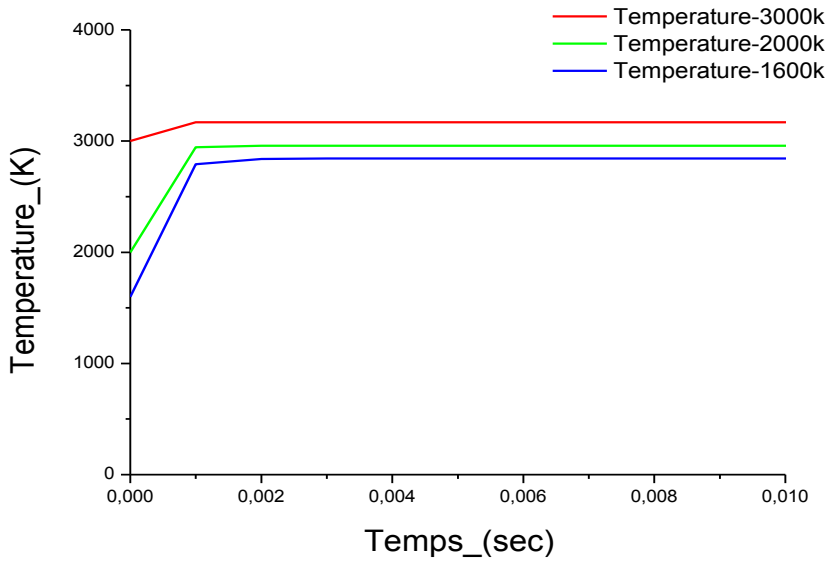
Figure(IV.9) : Fraction molaire **H** en fonction du **Temps**

On remarque que la fraction molaire des radicaux O et H augmentent rapidement jusqu'à la valeur maximale d'environ (0.016 et 0.08) respectivement, pour le même temps T=0.001secet atteint une valeur constante indiquant une stabilité de la flamme.



Figure(IV.10) : la fraction molaire OH en fonction du temps

Pour t= [0.000 à0.001] sec, le profile de la fraction molaire OH augmente jusqu'à la valeur maximale d'environ (0.035), puis se stabilise à cette valeur.



Figure(IV.11): la variation de la température

La figure (IV.11) présente l'évolution de la température en fonction du temps pour différentes valeurs de température de sortie du tube à choc :(T=1600k et, T=2000k et T=3000k). On remarque une augmentation de température jusqu'à une valeur maximale (T=2750k, T=2800k, T=3200k) respectivement dans le même temps [0.000-0.001] sec, puis se stabilise à cette valeur.

IV.3.2- Cas de l'Air:

Etape1:

- Créer un nouveau fichier par bloc-notes qu'on nomme **EXERCICE 2**, puis enregistre.
- Ecrire la réaction chimique sur le bloc-notes

```
ELEMENTS
O  H N  AR
END
!
SPECIES
H2      H       O       O2      OH      H2O     HO2     H2O2
N       NH      NH2     NH3     NNH     NO      NO2     HNO
N2      NO2
END
REACTIONS

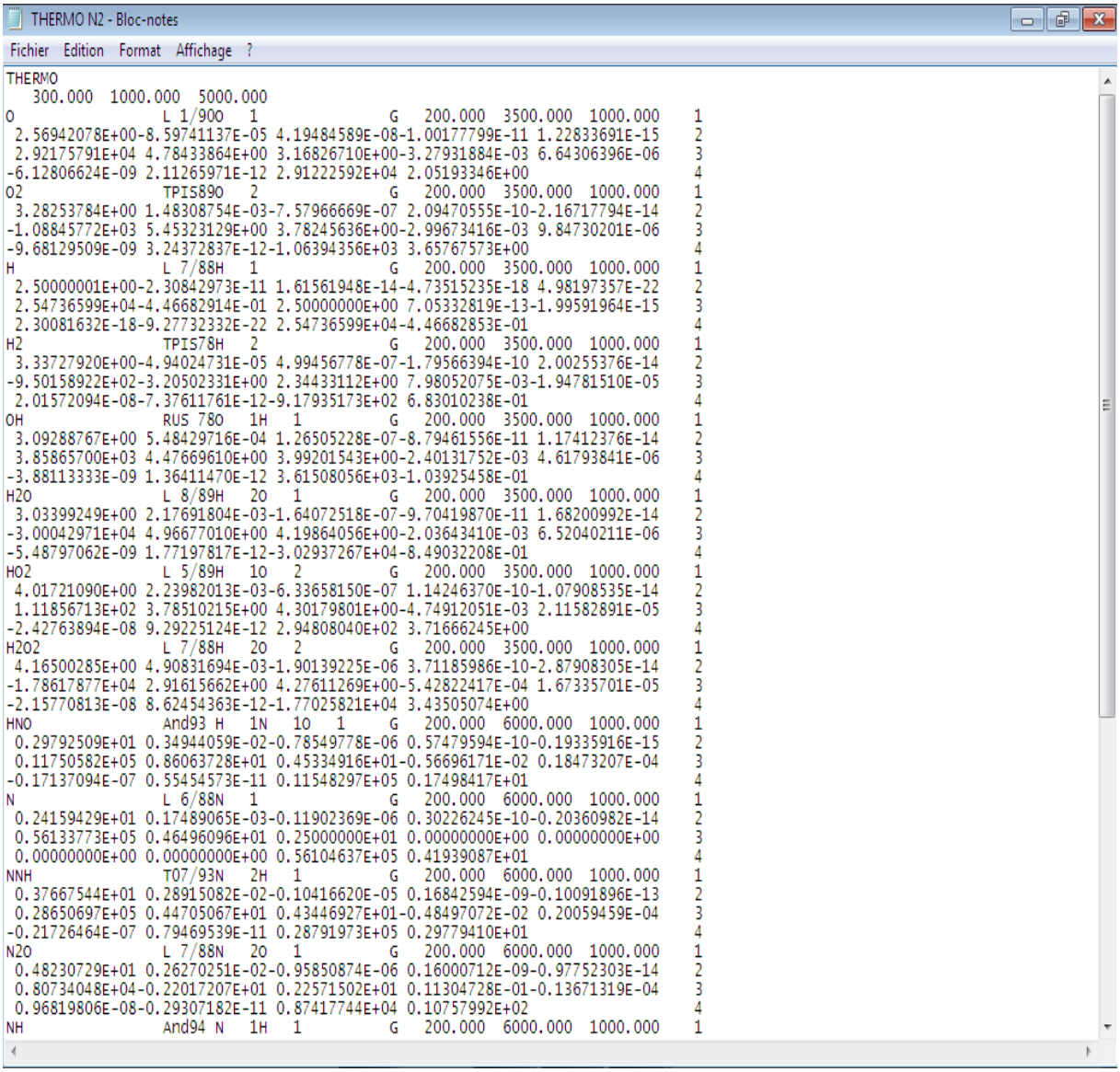
2O+M<=>O2+M                                1.200E+17   -1.000        .00
O+H+M<=>OH+M                               5.000E+17   -1.000        .00
O+H2<=>H+OH                                3.870E+04    2.700    6260.00
O+HO2<=>OH+O2                              2.000E+13     .000        .00
O+H2O2<=>OH+HO2                            9.630E+06    2.000    4000.00
H+O2+M<=>HO2+M                             2.800E+18    -.860        .00
H+2O2<=>HO2+O2                             2.080E+19   -1.240        .00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O                         11.26E+18    -.760        .00
H+O2+N2<=>HO2+N2                           2.600E+19   -1.240        .00

H+O2<=>O+OH                                2.650E+16    -.6707  17041.00
2H+M<=>H2+M                                1.000E+18   -1.000        .00
2H+H2<=>2H2                                9.000E+16    -.600        .00
2H+H2O<=>H2+H2O                            6.000E+19   -1.250        .00
H+OH+M<=>H2O+M                             2.200E+22   -2.000        .00
H+HO2<=>O+H2O                              3.970E+12     .000     671.00
H+HO2<=>O2+H2                              4.480E+13     .000    1068.00
H+HO2<=>2OH                                0.840E+14     .000     635.00
H+H2O2<=>HO2+H2                            1.210E+07    2.000    5200.00
H+H2O2<=>OH+H2O                            1.000E+13     .000    3600.00
OH+H2<=>H+H2O                              2.160E+08    1.510    3430.00
2OH+M<=>H2O2+M                             7.400E+13    -.370        .00
2OH<=>O+H2O                                3.570E+04    2.400   -2110.00
OH+HO2<=>O2+H2O                            1.450E+13     .000    -500.00
OH+H2O2<=>HO2+H2O                          2.000E+12     .000     427.00
OH+H2O2<=>HO2+H2O                          1.700E+18     .000   29410.00
2HO2<=>O2+H2O2                             1.300E+11     .000   -1630.00
2HO2<=>O2+H2O2                             4.200E+14     .000   12000.00
N+NO<=>N2+O                                2.700E+13     .000     355.00
N+O2<=>NO+O                                9.000E+09    1.000    6500.00
N+OH<=>NO+H                                3.360E+13     .000     385.00
N2O+O<=>N2+O2                              1.400E+12     .000   10810.00
N2O+O<=>2NO                                2.900E+13     .000   23150.00
N2O+H<=>N2+OH                              3.870E+14     .000   18880.00
N2O+OH<=>N2+HO2                            2.000E+12     .000   21060.00
N2O+M<=>N2+O+M                             7.910E+10     .000   56020.00
```

```
HO2+NO<=>NO2+OH                  2.110E+12     .000    -480.00
NO+O+M<=>NO2+M                   1.060E+20   -1.410        .00
NO2+O<=>NO+O2                    3.900E+12     .000    -240.00
NO2+H<=>NO+OH                    1.320E+14     .000     360.00
NH+O<=>NO+H                      4.000E+13     .000        .00
NH+H<=>N+H2                      3.200E+13     .000     330.00
NH+OH<=>HNO+H                    2.000E+13     .000        .00
NH+OH<=>N+H2O                    2.000E+09    1.200        .00
NH+O2<=>HNO+O                    4.610E+05    2.000    6500.00
NH+O2<=>NO+OH                    1.280E+06    1.500     100.00
NH+N<=>N2+H                      1.500E+13     .000        .00
NH+H2O<=>HNO+H2                  2.000E+13     .000   13850.00
NH+NO<=>N2+OH                    2.160E+13    -.230        .00
NH+NO<=>N2O+H                    3.650E+14    -.450        .00
NH2+O<=>OH+NH                    3.000E+12     .000        .00
NH2+O<=>H+HNO                    3.900E+13     .000        .00
NH2+H<=>NH+H2                    4.000E+13     .000    3650.00
NH2+OH<=>NH+H2O                  9.000E+07    1.500    -460.00
NNH<=>N2+H                       3.300E+08     .000        .00
NNH+M<=>N2+H+M                   1.300E+14    -.110    4980.00
NNH+O2<=>HO2+N2                  5.000E+12     .000        .00
NNH+O<=>OH+N2                    2.500E+13     .000        .00
NNH+O<=>NH+NO                    7.000E+13     .000        .00
NNH+H<=>H2+N2                    5.000E+13     .000        .00
NNH+OH<=>H2O+N2                  2.000E+13     .000        .00
H+NO+M<=>HNO+M                   4.480E+19   -1.320     740.00
HNO+O<=>NO+OH                    2.500E+13     .000        .00
HNO+H<=>H2+NO                    9.000E+11     .720     660.00
HNO+OH<=>NO+H2O                  1.300E+07    1.900    -950.00
HNO+O2<=>HO2+NO                  1.000E+13     .000   13000.00
NH3+H<=>NH2+H2                   5.400E+05    2.400    9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O                 5.000E+07    1.600     955.00
NH3+O<=>NH2+OH                   9.400E+06    1.940    6460.00
OH+HO2<=>O2+H2O                  0.500E+16     .000   17330.00


END
```

- Créer un autre fichier par bloc-notes pour faire entrer les **propriétés thermodynamique.**



THERMO N2 - Bloc-notes

Fichier Edition Format Affichage ?

```
THERMO
   300.000  1000.000  5000.000
O                 L 1/90O   1               G   200.000  3500.000  1000.000    1
 2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-1.00177799E-11 1.22833691E-15    2
 2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-3.27931884E-03 6.64306396E-06    3
-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04 2.05193346E+00                   4
O2                TPIS89O   2               G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07 2.09470555E-10-2.16717794E-14    2
-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-2.99673416E-03 9.84730201E-06    3
-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00                   4
H                 L 7/88H   1               G   200.000  3500.000  1000.000    1
 2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-4.73515235E-18 4.98197357E-22    2
 2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00 7.05332819E-13-1.99591964E-15    3
 2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-4.46682853E-01                   4
H2                TPIS78H   2               G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.33727920E+00-4.94024731E-05 4.99456778E-07-1.79566394E-10 2.00255376E-14    2
-9.50158922E+02-3.20502331E+00 2.34433112E+00 7.98052075E-03-1.94781510E-05    3
 2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E+02 6.83010238E-01                   4
OH                RUS 78O   1H   1          G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.09288767E+00 5.48429716E-04 1.26505228E-07-8.79461556E-11 1.17412376E-14    2
 3.85865700E+03 4.47669610E+00 3.99201543E+00-2.40131752E-03 4.61793841E-06    3
-3.88113333E-09 1.36411470E-12 3.61508056E+03-1.03925458E-01                   4
H2O               L 8/89H   2O   1          G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.03399249E+00 2.17691804E-03-1.64072518E-07-9.70419870E-11 1.68200992E-14    2
-3.00042971E+04 4.96677010E+00 4.19864056E+00-2.03643410E-03 6.52040211E-06    3
-5.48797062E-09 1.77197817E-12-3.02937267E+04-8.49032208E-01                   4
HO2               L 5/89H   1O   2          G   200.000  3500.000  1000.000    1
 4.01721090E+00 2.23982013E-03-6.33658150E-07 1.14246370E-10-1.07908535E-14    2
 1.11856713E+02 3.78510215E+00 4.30179801E+00-4.74912051E-03 2.11582891E-05    3
-2.42763894E-08 9.29225124E-12 2.94808040E+02 3.71666245E+00                   4
H2O2              L 7/88H   2O   2          G   200.000  3500.000  1000.000    1
 4.16500285E+00 4.90831694E-03-1.90139225E-06 3.71185986E-10-2.87908305E-14    2
-1.78617877E+04 2.91615662E+00 4.27611269E+00-5.42822417E-04 1.67335701E-05    3
-2.15770813E-08 8.62454363E-12-1.77025821E+04 3.43505074E+00                   4
HNO               And93 H   1N   1O   1     G   200.000  6000.000  1000.000    1
 0.29792509E+01 0.34944059E-02-0.78549778E-06 0.57479594E-10-0.19335916E-15    2
 0.11750582E+05 0.86063728E+01 0.45334916E+01-0.56696171E-02 0.18473207E-04    3
-0.17137094E-07 0.55454573E-11 0.11548297E+05 0.17498417E+01                   4
N                 L 6/88N   1               G   200.000  6000.000  1000.000    1
 0.24159429E+01 0.17489065E-03-0.11902369E-06 0.30226245E-10-0.20360982E-14    2
 0.56133773E+05 0.46496096E+01 0.25000000E+01 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.56104637E+05 0.41939087E+01                   4
NNH               T07/93N   2H   1          G   200.000  6000.000  1000.000    1
 0.37667544E+01 0.28915082E-02-0.10416620E-05 0.16842594E-09-0.10091896E-13    2
 0.28650697E+05 0.44705067E+01 0.43446927E+01-0.48497072E-02 0.20059459E-04    3
-0.21726464E-07 0.79469539E-11 0.28791973E+05 0.29779410E+01                   4
N2O               L 7/88N   2O   1          G   200.000  6000.000  1000.000    1
 0.48230729E+01 0.26270251E-02-0.95850874E-06 0.16000712E-09-0.97752303E-14    2
 0.80734048E+04-0.22017207E+01 0.22571502E+01 0.11304728E-01-0.13671319E-04    3
 0.96819806E-08-0.29307182E-11 0.87417744E+04 0.10757992E+02                   4
NH                And94 N   1H   1          G   200.000  6000.000  1000.000    1
```

Etape2et **3 : similaires au** 1ercas

Etape4 : double click sur pré-processing et click :

1- new chemistry set pour entrer les données suivantes :

- Gaz-phase kinetics File :

  C:\Documents and Settings\Administrator\EXERCICE 2\Files of type All Fill\

  reaction.txt.

- Thermo-dynamique : C:\Thermo.txt

- Save as, et choisie « EXERCICE 2»

-Save

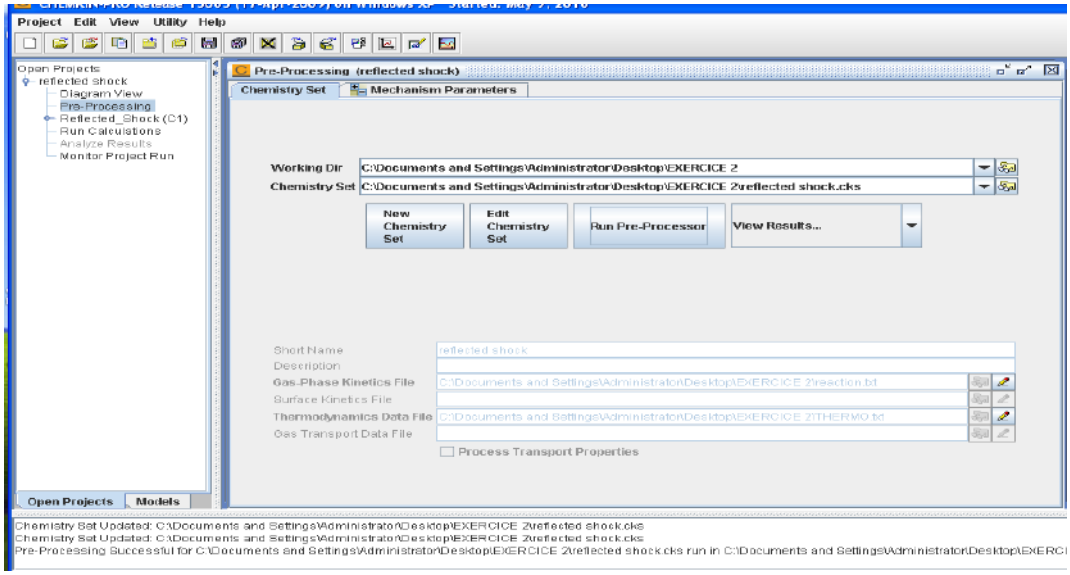


Figure (IV.12): Fenêtre de chemistry set

2- Edit **chemistry** set: Click sur Save.

3- Run pré-processor et active View resulte.

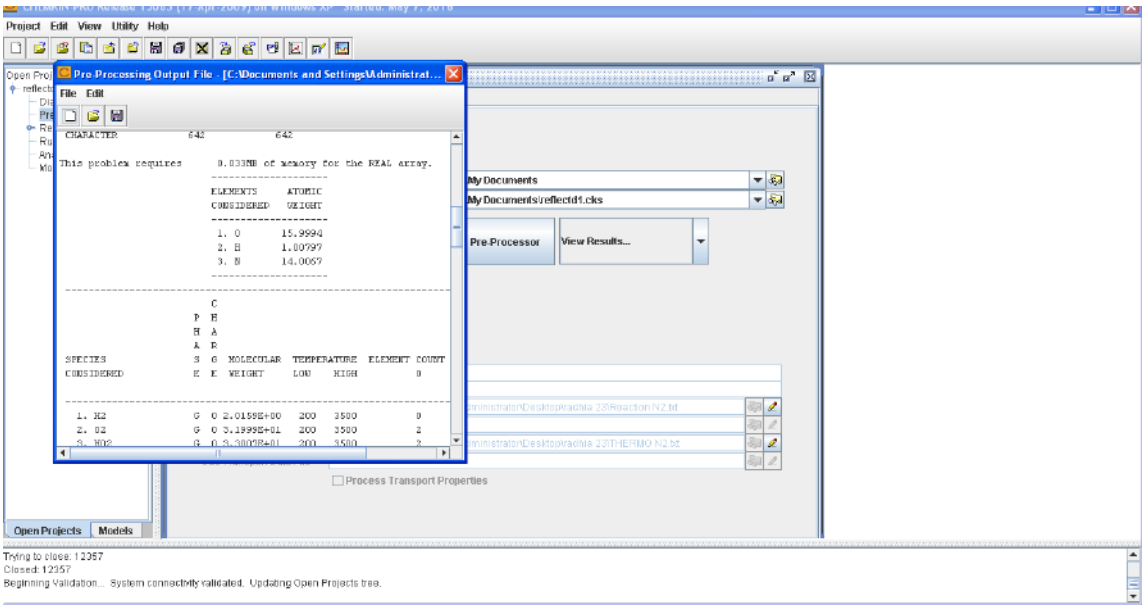


Figure (IV.13) : Fenêtre de View resulte.

Etape4: Double click sur reflected-shock (C1) et Click sur

1-C1-reflected-shock pour l'entre des propriétés suivantes :

-les propriétés physiques :Temps=1sec, Température=3000k et pression=1atm

- les espèces réactives (Réactant species) : hydrogène(H2)= 0.30, oxygène(O2)= 0.15, azote(N2)=0.55.

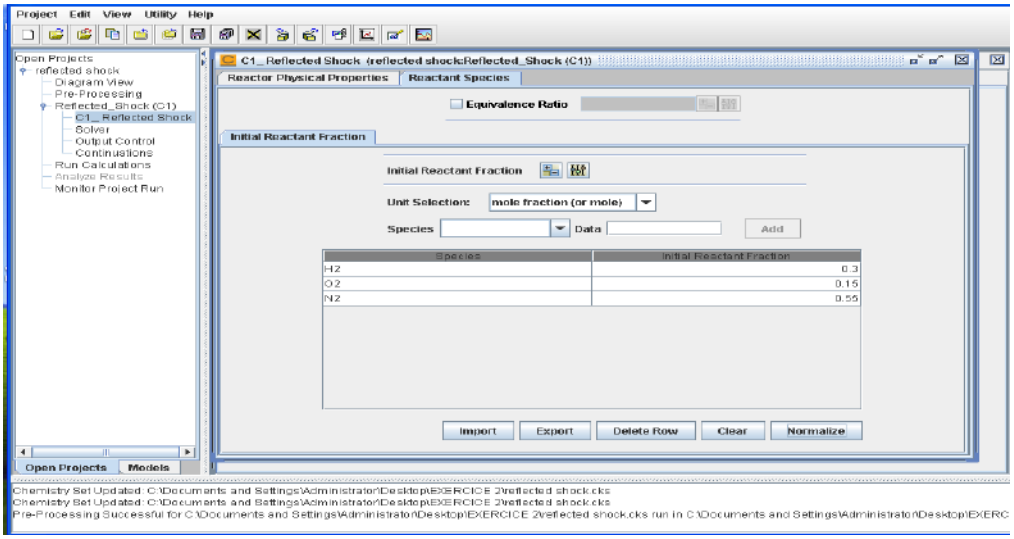


Figure (IV.14) : Fenêtre de Réactant species

Etape6: Double click sur Run calculations – Begin – Next step –process solution Data

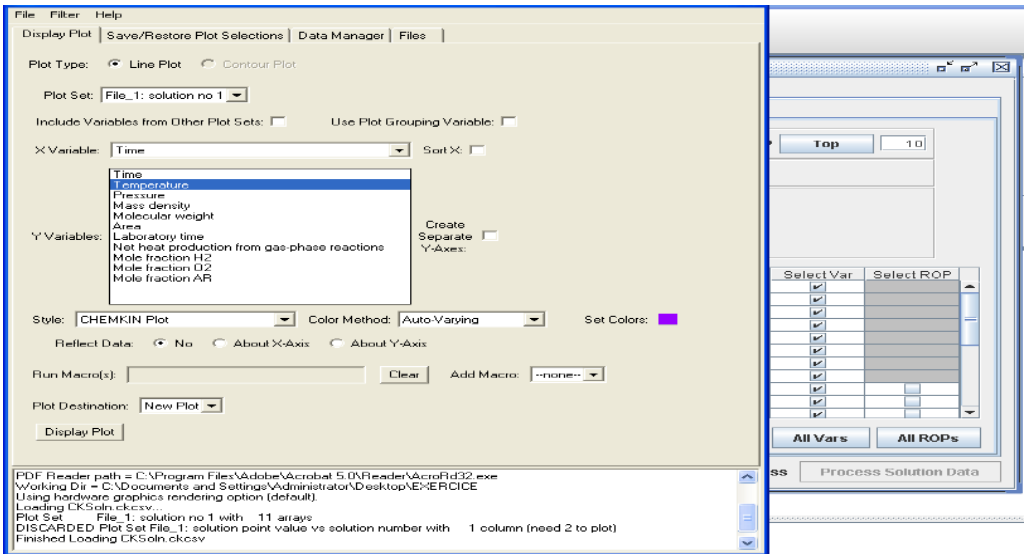
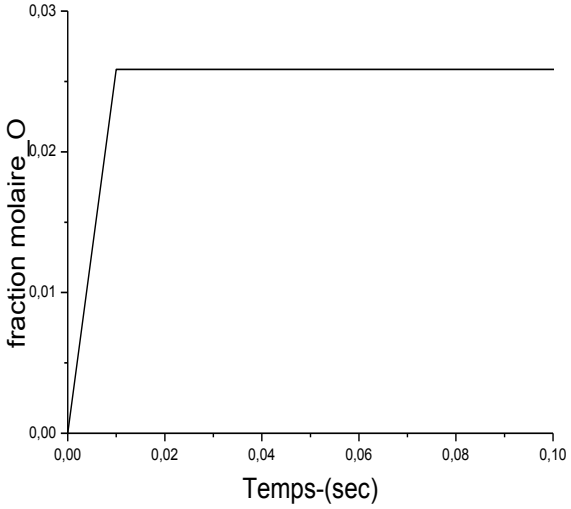


Figure (IV.15) : Fenêtre de calcul

IV.4 Graphes du cas de la combustion avec de l'air :



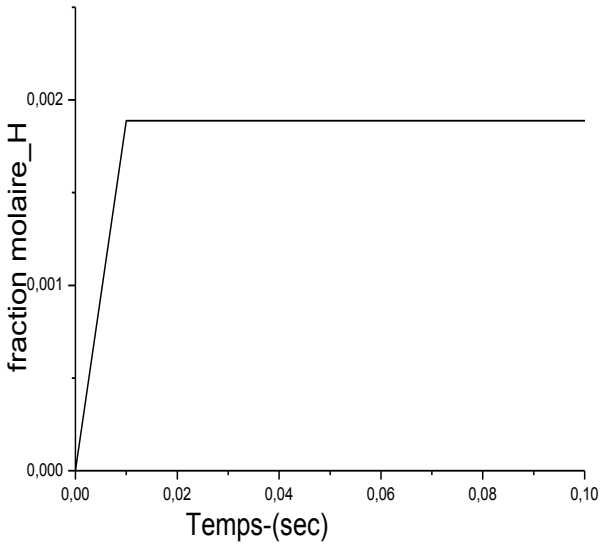
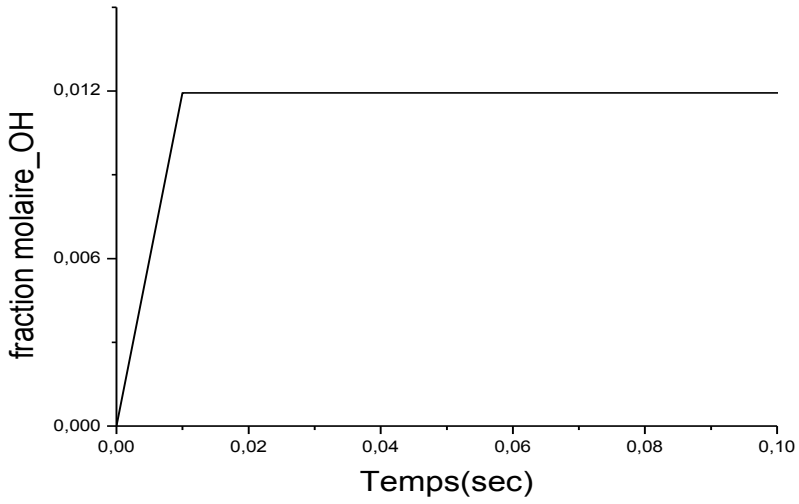


Figure (IV.16) : Fraction molaire **O** en fonction du **Temps**

Figure (IV.17) : Fraction molaire **H** en fonction du **Temps**

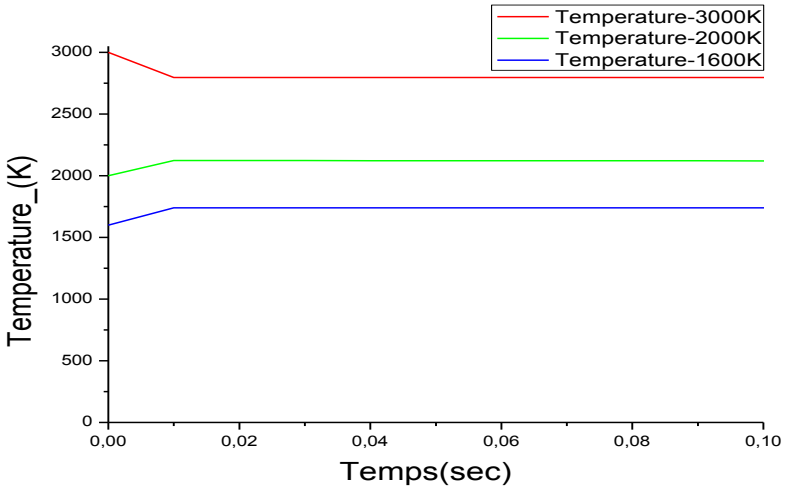
Le profile de fraction molaire de O et H en fonction du temps montre une augmentation rapide vers une valeur maximale d'environ (0.025 et 0.0019) respectivement à l'instant 0.01sec, puis demeure stabilisé à cette valeur max.



Figure(IV.18) : la fraction molaire OH en fonction du temps

Pour t= [0.00 à0.01] sec, le profile de fraction molaire de OH augmente rapidement jusqu'à la valeur max(0.012), puis reste constant.

.



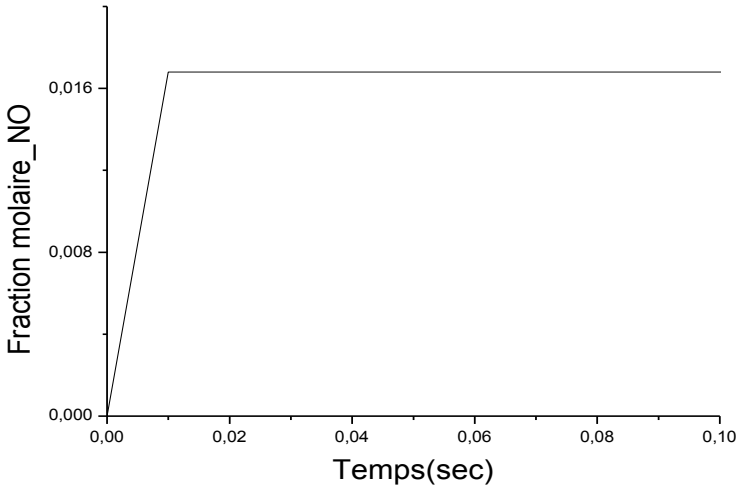
Figure(IV.19): la variation de la température

La figure (IV-19) représente l'évolution de la température en fonction du temps pour différentes valeurs de température de sortie du tube :(T=1600k et, T=2000k et T=3000k).

- Pour T=1600k et T=2000k, on remarque une augmentation de température jusqu'à une valeur

(T=1750et T=2250k) respectivement dans le même temps [0.000-0.001] sec, puis se stabilise à cette valeur maximale.

Pour T=3000k, on remarque une diminution de la température jusqu'à une valeur T =2750k dans 'instant 0.01sec puis demeure constante.



Figure(IV.20) : la fraction molaire NO en fonction du temps.

On remarque une augmentation dans le profile de la fraction molaire NO jusqu'à une valeur optimale à l'instant 0.01sec puis demeure constante.

IV.4Etude Comparative :

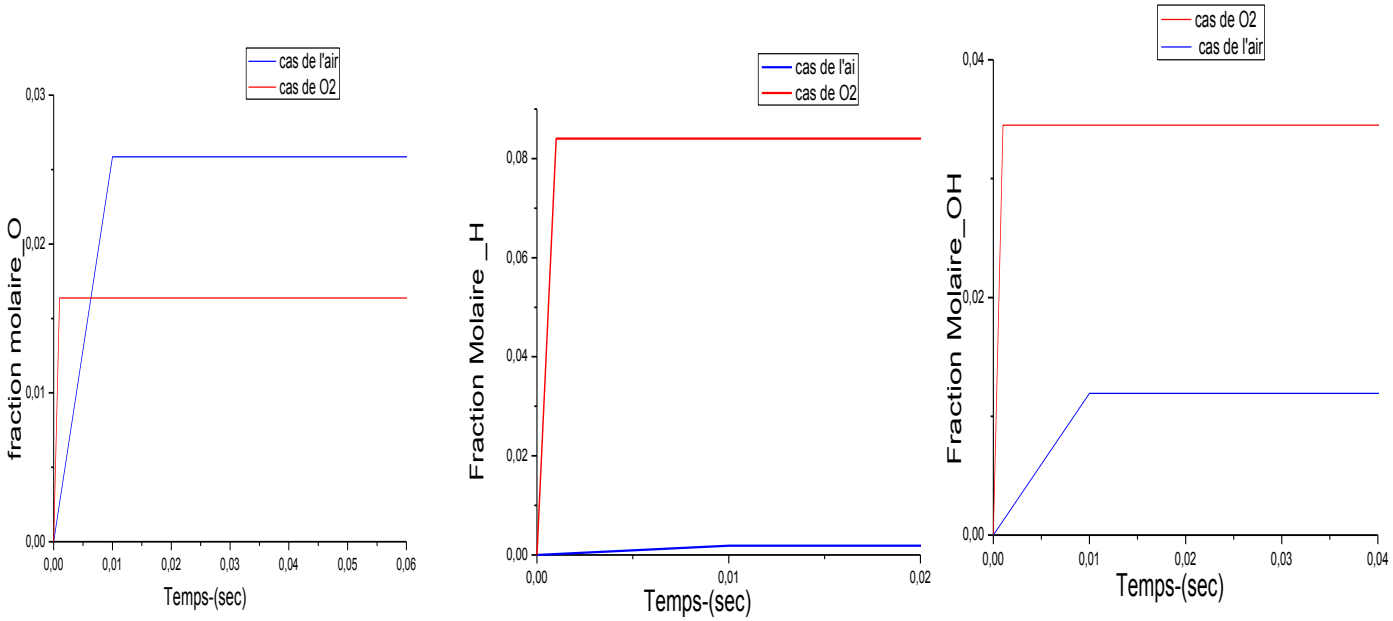
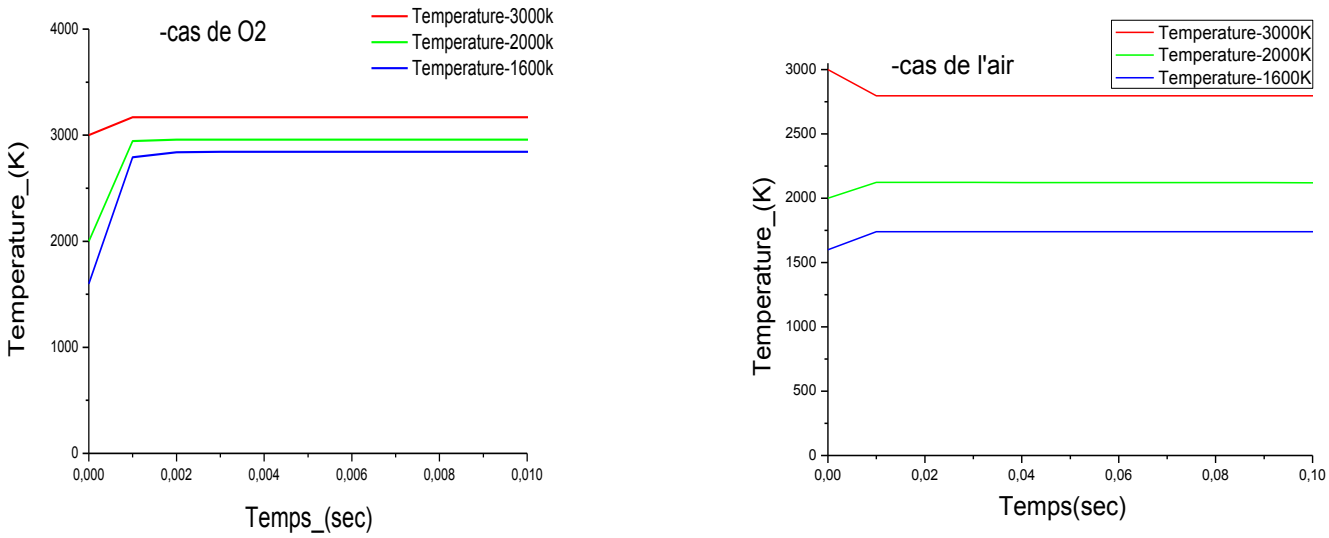


Figure (IV.21): variation des fractions molaires de O, H, OH.

La figure**(IV.21)** représente l'évolution des fractions molaires de O, H, OH en fonction du temps pour les deux cas : cas de la combustion avec de l'air et celui de la combustion avec de l'O2.

Donc d'après la comparaison entre les deux cas, on remarque que :

- L'utilisation de l'oxygène comme comburant favorise la production de niveaux élevés des radicaux H et OH, tandis que l'utilisation de l'air cause la production de grande quantités de O et de NO.
- On constate que la flamme de la réaction avec l'oxygène parait plus rapide que celle avec de l'air, ce qui donne un avantage à l'O2 pour quelques cas pratiques comme l'aérospatial.



Figure(IV.22) : la variation de la température

D'autre part, la figure (IV.22) montre que la flamme d'oxygène permet d'avoir une flamme à des niveaux de températures plus élevés relativement au cas de la flamme à l'air. Ceci impose la réflexion à l'utilisation d'un système de refroidissement plus efficace.

IV.5 Cas 3 : Flamme d'un brûleur stabilisé (Burner-stabilized Flame)

IV.5 .1 Introduction :

Ce cas présente une simulation d'une flamme laminaire pré-mélangée d'un brûleur stabilisé d'hydrogène et d'oxygène à basse pression. Ce projet utilise le jeu de chimie pour combustion de l'hydrogène. Ce type de Brûleur stabilisé est souvent utilisé pour étudier la cinétique chimique dans un environnement de combustion. De telles flammes sont effectivement caractérisées par une dimension et peut être très stable ; ce qui facilite des mesures expérimentales détaillées des profils de température et d'espèces. Aussi, la vitesse de flamme laminaire est souvent utilisée pour caractériser la combustion de diverses combinaisons d'oxydant du combustible. Par conséquent, la capacité à modéliser la cinétique chimique et du processus de transport dans ces flammes est essentiel pour interpréter les expériences de flamme et de la compréhension du processus de combustion elle-même.

Des exemples de l'utilisation de la modélisation de la flamme pour interpréter les observations expérimentales et de vérifier la chimie de combustion et la formation de polluants peut être trouvée dans le travail de Miller et al.

IV.5 .2 Définition d'une Flamme pré mélangée :

C'est est une flamme qui se crée dans un bruleur où l'oxydant a été mélangé avec le combustible avant qu'il atteigne le front de flamme. Cela crée un mince front de flamme que tous les réactifs sont facilement disponibles. Si le mélange est riche, une flamme de diffusion sera généralement trouvée plus loin en aval.

Si l'écoulement du mélange combustible-oxydant est laminaire, la vitesse de la flamme de flammes pré-mélangées est dominée par la chimie. Si le débit est inférieur à la vitesse de la flamme, la flamme se déplace vers l'amont jusqu'à ce que le carburant soit consommé ou jusqu'à ce qu'il rencontre un porte-flamme. Si le débit est égal à la vitesse de la flamme, nous nous attendons à un front stationnaire de flamme normale à la direction d'écoulement. Si le débit est supérieur à la vitesse de flamme, le front conique de flamme se forme de telle sorte que la composante de vecteur vitesse normale au front de flamme est égale à la vitesse de la flamme. En conséquence, le front de flamme de la plupart des pré-mélangés flammes dans la vie quotidienne sont à peu près conique.

IV.5 .3Condition initiale de pré-mixed :

- Problème de type : Fix Gaz Température.
- La pression : 0.0329 atm.
- Fraction molaire : hydrogène(H2)= 0.28, oxygène(O2)= 0.09, agrume(AR)= 0.63.
- La densité **:** 4.6g/cm^2 Sec.

Problème de projet : le problème est l'étude numérique de la stabilisation des flammes avec un code CHIMKIN. On utilise le mode de pré-mixed.

IV.5 .4Présentation :

ETAPE1 :

- créer un fichier bloc-notes dans lequel on entre la réaction chimique, et un autre fichier pour entrer les propriétés thermodynamiques.
- enregistrer les fichiers dans le répertoire de travail lu par chemkin.
- entrer la réaction chimique :

```
ELEMENTS
O  H  AR
END
! SPECIES
H2 O2 HO2 H OH O H2O H2O2 AR
END
REACTIONS

H2+O2=HO2+H          7.00E+13          0          56800
H+O2=OH+O            2.20E+14          0          16800
O+H2=OH+H            5.06E+04          2.67        6290
OH+H2=H2O+H          2.66E+08          1.51        3430
OH+OH=H2O+O          1.50E+09          1.14           0
H+OH+M=H2O+M         8.62E+21         -2.0            0
H+H+M=H2+M           7.30E+17         -1.0            0
H+O+M=OH+M           2.60E+16         -0.6            0
O+O+M=O2+M           1.10E+17         -1.0            0
H+O2+M=HO2+M         2.30E+18         -1.0            0
HO2+H=OH+OH          1.50E+14          0           1000
HO2+O=O2+OH          2.00E+13          0              0
HO2+OH=H2O+O2        2.00E+13          0              0
HO2+HO2=H2O2+O2      2.00E+12          0              0
H+H2O2=H2+HO2        1.70E+12          0           3780
H+H2O2=OH+H2O        1.00E+13          0           3580
O+H2O2=OH+HO2        2.80E+13          0           6400
OH+H2O2=H2O+HO2      7.00E+12          0           1435
OH+OH+M=H2O2+M       1.60E+22          -2.2           0

END
```

Entrer les propriétés thermodynamiques :

Thermo - Bloc-notes

Fichier Edition Format Affichage ?

```
THERMO
   300.000  1000.000  5000.000
O                 L 1/90O   1             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-1.00177799E-11 1.22833691E-15    2
 2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-3.27931884E-03 6.64306396E-06    3
-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04 2.05193346E+00                   4
O2                TPIS89O   2             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07 2.09470555E-10-2.16717794E-14    2
-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-2.99673416E-03 9.84730201E-06    3
-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00                   4
H                 L 7/88H   1             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-4.73515235E-18 4.98197357E-22    2
 2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00 7.05332819E-13-1.99591964E-15    3
 2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-4.46682853E-01                   4
H2                TPIS78H   2             G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.33727920E+00-4.94024731E-05 4.99456778E-07-1.79566394E-10 2.00255376E-14    2
-9.50158922E+02-3.20502331E+00 2.34433112E+00 7.98052075E-03-1.94781510E-05    3
 2.01572094E-08-7.37611761E-12-9.17935173E+02 6.83010238E-01                   4
OH                RUS 78O   1H  1         G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.09288767E+00 5.48429716E-04 1.26505228E-07-8.79461556E-11 1.17412376E-14    2
 3.85865700E+03 4.47669610E+00 3.99201543E+00-2.40131752E-03 4.61793841E-06    3
-3.88113333E-09 1.36411470E-12 3.61508056E+03-1.03925458E-01                   4
H2O               L 8/89H   2O  1         G   200.000  3500.000  1000.000    1
 3.03399249E+00 2.17691804E-03-1.64072518E-07-9.70419870E-11 1.68200992E-14    2
-3.00042971E+04 4.96677010E+00 4.19864056E+00-2.03643410E-03 6.52040211E-06    3
-5.48797062E-09 1.77197817E-12-3.02937267E+04-8.49032208E-01                   4
HO2               L 5/89H   1O  2         G   200.000  3500.000  1000.000    1
 4.01721090E+00 2.23982013E-03-6.33658150E-07 1.14246370E-10-1.07908535E-14    2
 1.11856713E+02 3.78510215E+00 4.30179801E+00-4.74912051E-03 2.11582891E-05    3
-2.42763894E-08 9.29225124E-12 2.94808040E+02 3.71666245E+00                   4
H2O2              L 7/88H   2O  2         G   200.000  3500.000  1000.000    1
 4.16500285E+00 4.90831694E-03-1.90139225E-06 3.71185986E-10-2.87908305E-14    2
-1.78617877E+04 2.91615662E+00 4.27611269E+00-5.42822417E-04 1.67335701E-05    3
-2.15770813E-08 8.62454363E-12-1.77025821E+04 3.43505074E+00                   4
AR                120186AR  1             G   300.000  5000.000  1000.000    1
 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.07453750E+04 0.04366000E+02 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.07453750E+04 0.04366000E+02                   4

AR                120186AR  1             G   300.000  5000.000  1000.000    1
 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00    2
-0.07453750E+04 0.04366000E+02 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00    3
 0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.07453750E+04 0.04366000E+02                   4
END
```

Etape 2 : Lancez CHEMKIN-PRO et click sur CHEMKIN-PRO Release 15083.



Figure (IV.23) : Sélectionnée Fenêtre de CHEMKIN-PRO

Etape3 : - click sur projet et choisir close all et créer nouveau projet nommée« pré_mixed_burner stabilized ».

-click sur model et choisir {Inlet_surce, pré-mixed-burner, outlet flow(Product)}.

-click sur update Project.

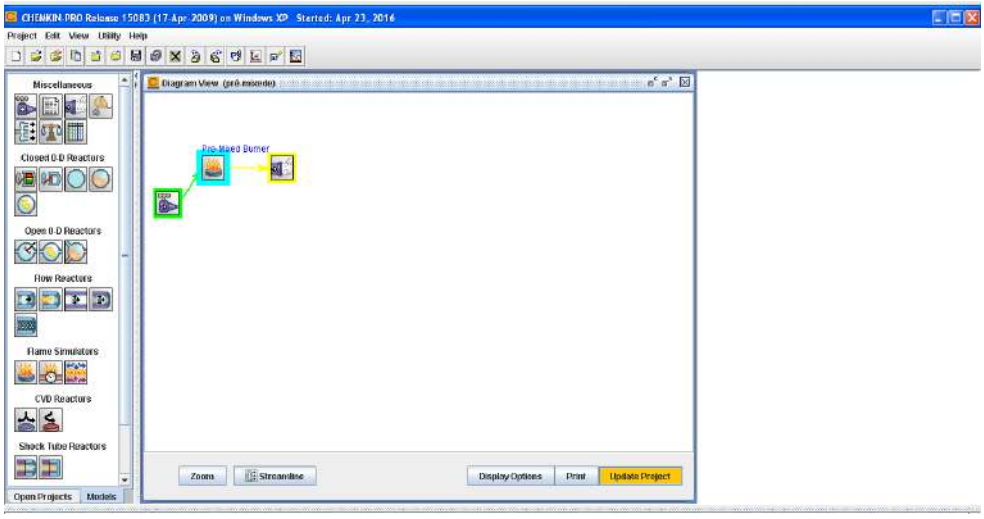


Figure (IV.24) : Menu de lancement d'un cas de pré-mixed-burner

Etape4 : double click sur pré-processing et click :

1- new chemistry set et entrer les données suivantes :

- Gaz-phase kinetics File : C:\Documents andSettings\Administrator\Desktop\19042016\burner_stabilized\pre-mixed_burner__burner_stabilized.inp.
- Thermodynamique : C:\ProgramFiles\Reaction\chemkin15083_pc\data\grimech30_thermo.dat
- Gaz transport Data File : C:\Program Files\Reaction\chemkin15083_pc\data\ tran.dat

- Save as, et choisir « pre-mixed_burner__burner_stabilized.cks ».

-Save

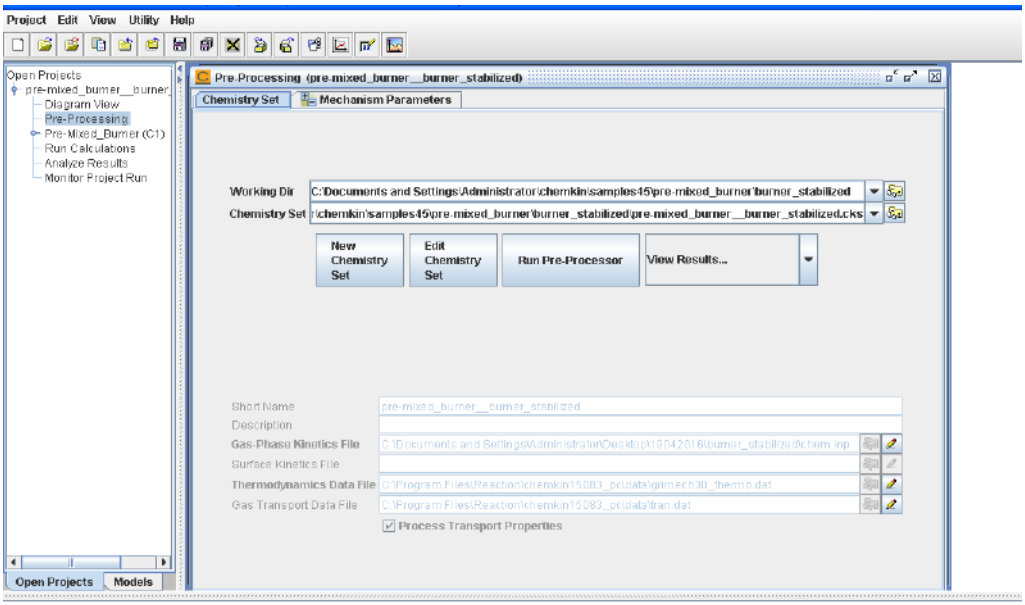


Figure (IV.25): Fenêtre de chemistry set

2- Edit chemistry set : Click sur Save.

3- Run pre-processor et active View result.

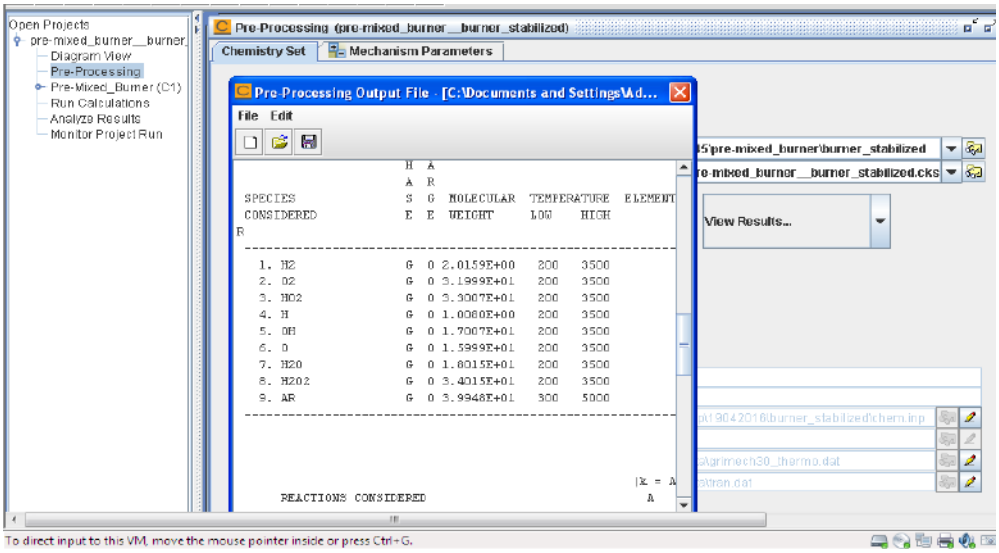


Figure (IV.26): Fenêtre de View resulte.

Etape4 : double click sur pré-mixed Burner(C1) Click sur :

1- C1 –Pré-mixed Burner et entrer la propriété suivante :

-Reacteur physical properties : Type de problème Fix gaz température

et Pressure =0.0329atm.

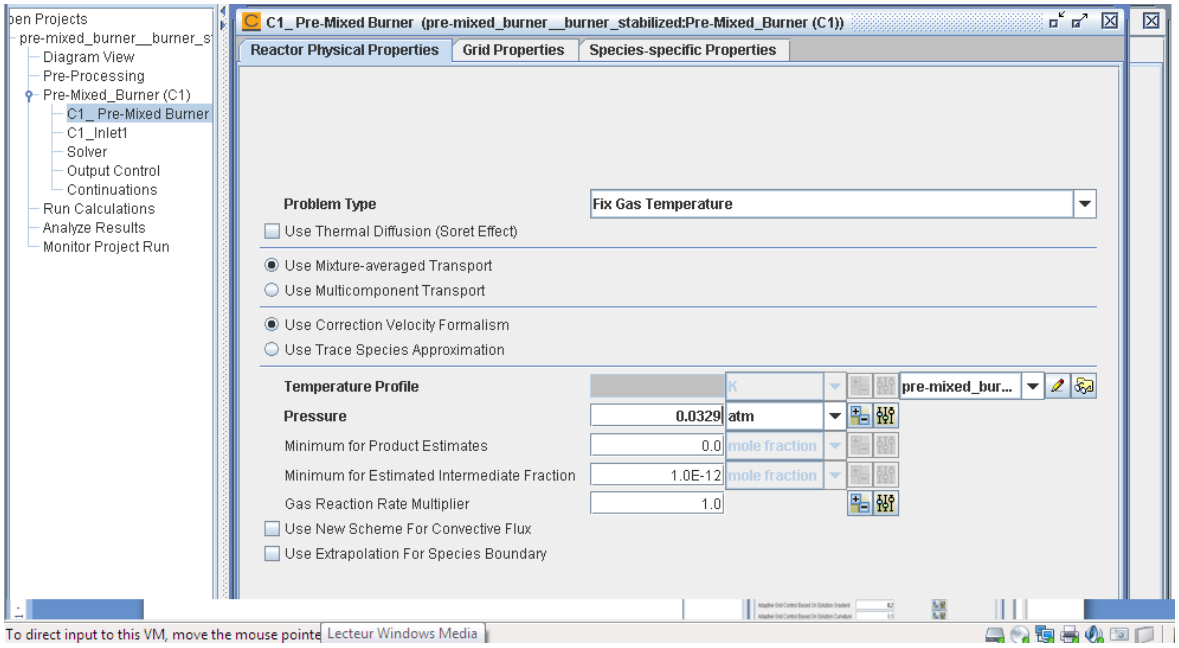


Figure (IV.27) : Fenêtre de Reacteur physical properties

2- Grid properties:

-Basic: Endding Axial position 10cm.

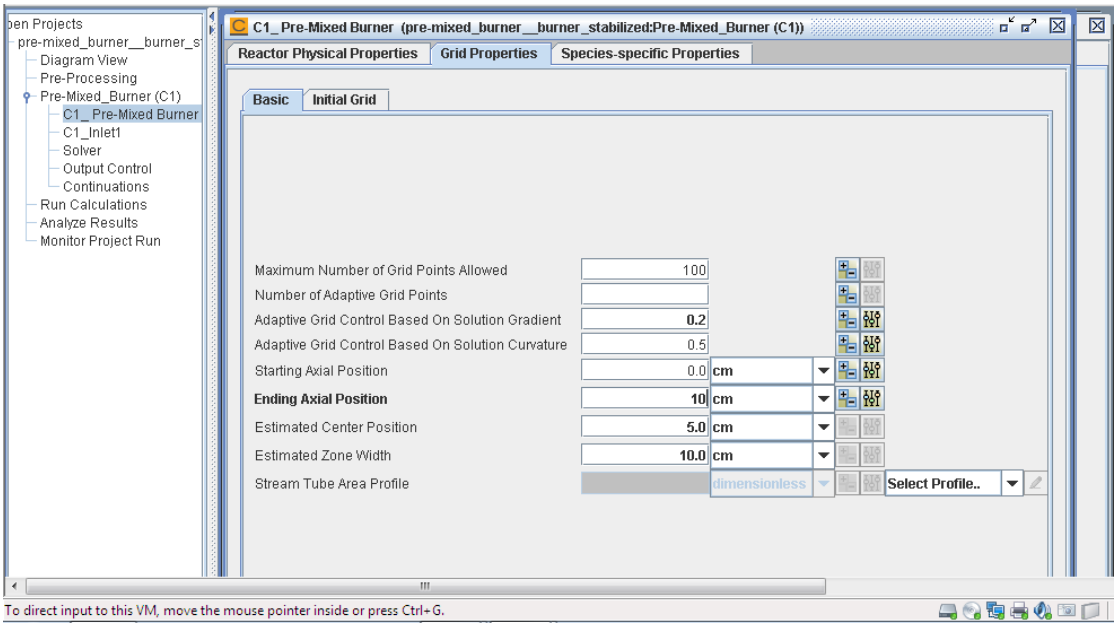


Figure (IV.28) : Fenêtre de Grid properties

-Initial Grid :Number of uniform Grid Points 6.

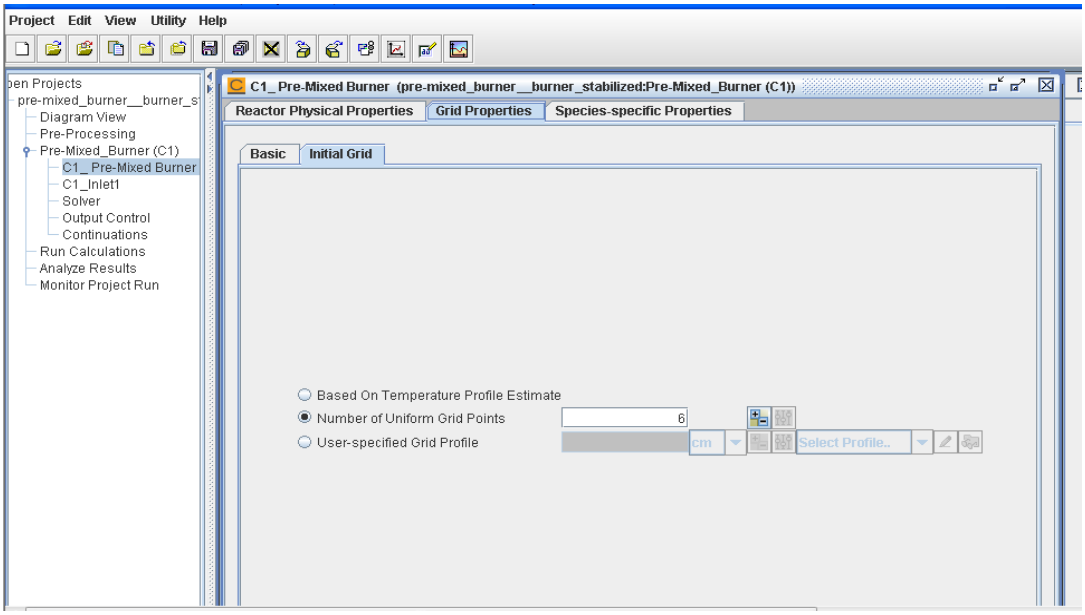


Figure (IV.29) : Fenêtre d'Initial Grid

3- C1-inlet :

-Entrer le débit massique 4.6mg/cm^2 Sec.

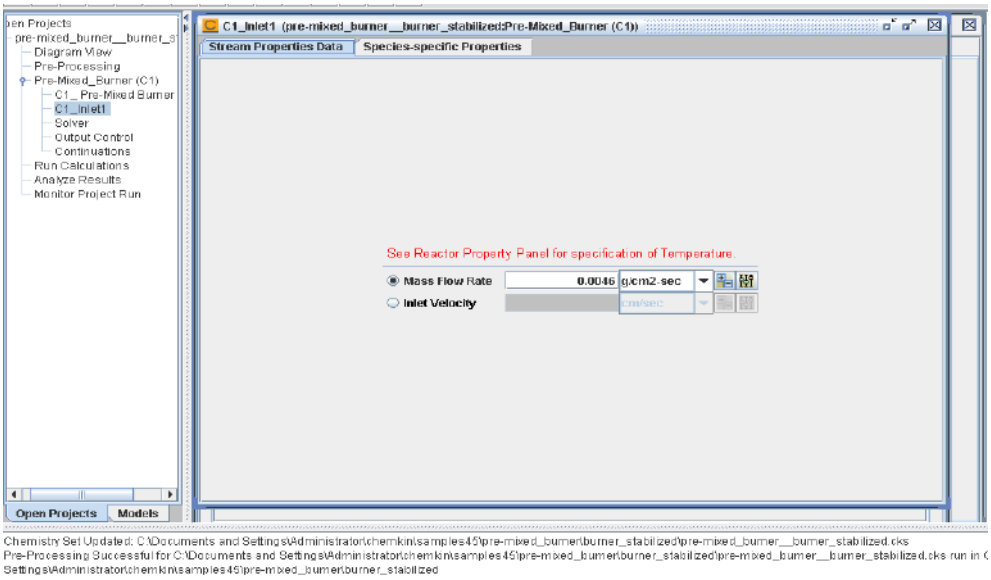


Figure (IV.30) : Fenêtre des tream properties data.

-Species-Speclfic Properties : Entrer les valeurs initiales « Reactant fraction ».

hydrogène (H_2=0.28), oxygéné (O_2=0.09), argum (AR=0.63).

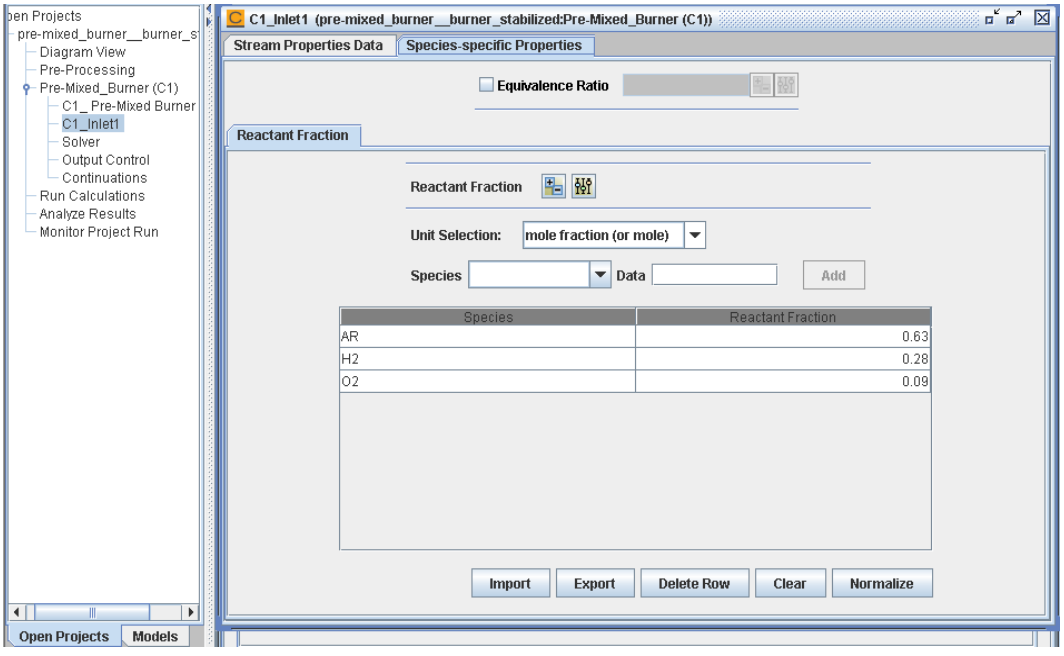


Figure (IV.31) : Fenêtre de Reactant fraction

Etape5 : Double click sur Run calculations – Begin – Next step –process solution Data

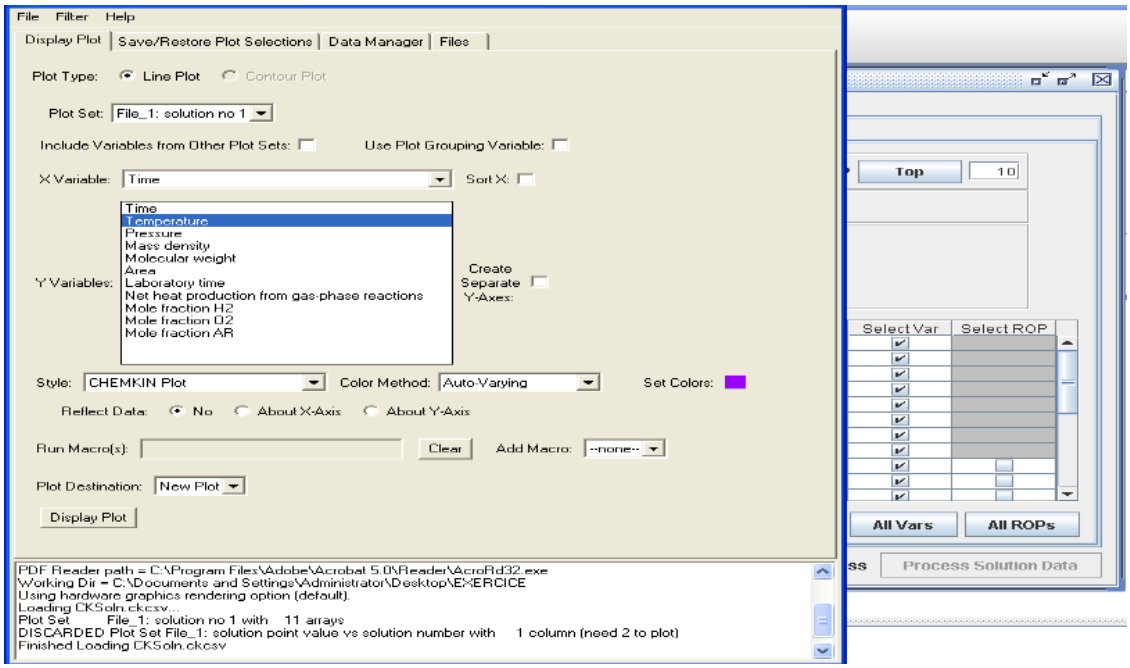
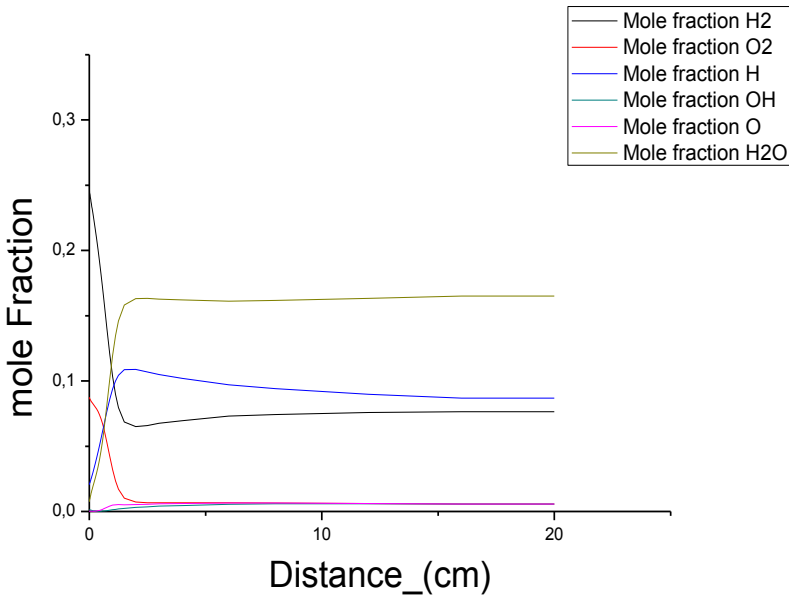


Figure (IV.32) : Fenêtre de calcul.

IV.5 .5 Résultats :

IV.5 .5 Tracée les graphes :



Figure(IV.33) : variation des fractions molaires.

Les Figures (33 et 34) montrent le comportement de la composition du gaz de combustion de l'espèce primaire dans la direction axial de la chambre de combustion, avec la plupart de l'oxygène réagissant à l'extérieur dans les 2 premiers cm à partir du bruleur. A la plus grande la distance, certains des atomes d'hydrogène se recombinent pour former de l'hydrogène moléculaire. Cela aura lieude manière significative dans le cas d'une flamme de carburant pauvre.

Une inspection du fichier texte montre que la simulation a maintenant 6 points de la grille. Elle est plus dense au niveau des distances inférieures, si nécessaire pour résoudre les changements plus rapides de la composition chimique et la température se produisant dans cette région.

IV.5 .5.1-Effet de la pression d'entrée « P » :

On étudie les variations de la fraction molaire en fonction de la distance, en changeant la pression (P=0.0329 atm, 1atm, 5atm) pour une longueur fixe de la chambre de combustion (L=10cm).

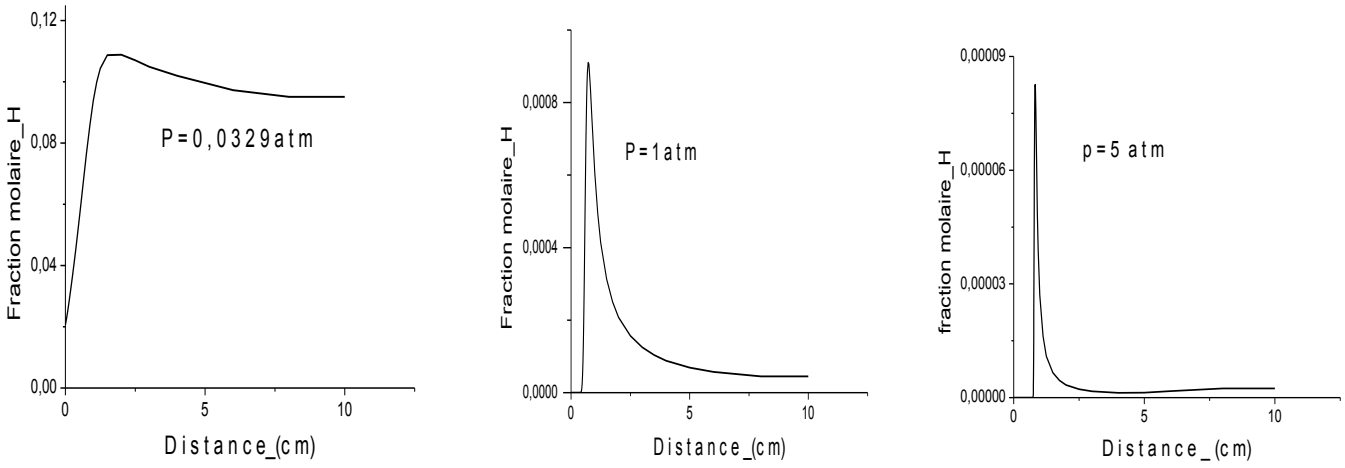


Figure (IV.34) : variation de fraction molaire H

La figure (34) représente la variation de la fraction molaire du radical H dans la direction axiale de la chambre de combustion pour différentes valeurs de la pression.

Pour P=0.0329atm, on remarque une fraction molaire H qui augmente rapidement jusqu'à une valeur maximale de 0.11 pour la distance D=1.5 cm puis diminue progressivement jusqu'à 0.09 ; valeur à laquelle se stabilise la flamme.

Pour P=1atm, on remarque le même comportement mais avec une valeur maximale de la fraction molaire H d'environ 0.0008 pour une distance de D=1.5 cm et se stabilise à une valeur de 0.0001.

Pour P=5atm, on obtient une limite maximale d'environ 0.000085.

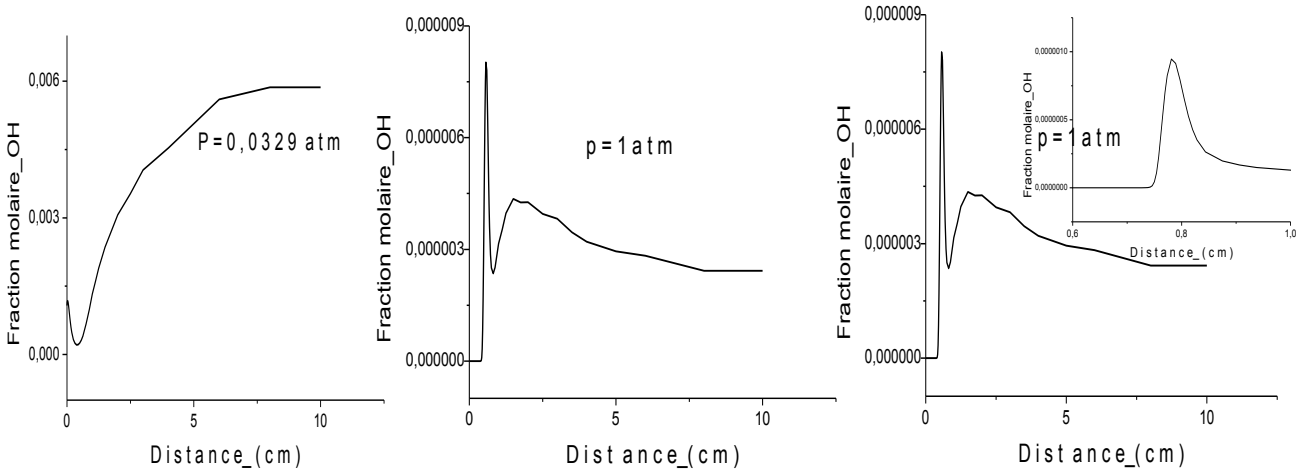


Figure (IV.35) : la variation de fraction molaire_OH.

La figure (35) représente la variation de la fraction molaire du radical OH dans la direction axiale de la chambre de combustion pour différentes valeurs de la pression.

Pour P=0.0329atm, on remarque une fraction molaire OH qui augmente rapidement jusqu'à une valeur maximale de 0.006 pour la distance D=1.5 cm puis diminue progressivement jusqu'à 0.09 ; valeur à laquelle se stabilise la flamme.

Pour P=1atm, on remarque le même comportement mais avec une valeur maximale de la fraction molaire OH d'environ 8.00E-6 pour une distance de D=1.5 cm et se stabilise à une valeur de 2.00 E-6.

Pour P=5atm, on obtient une limite maximale d'environ 9.00 E-7.

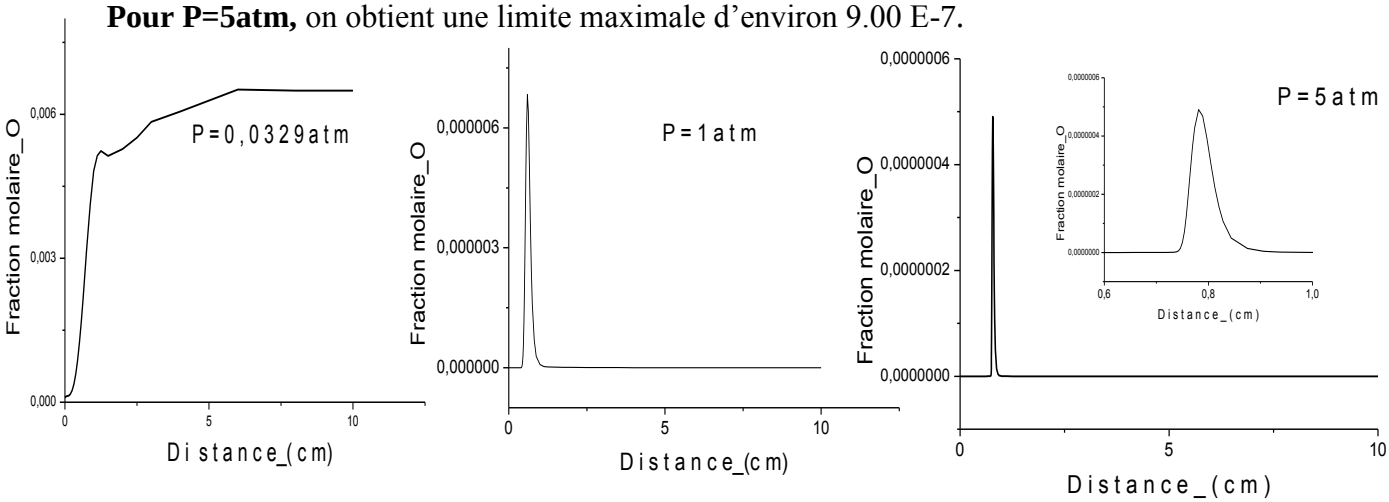


Figure (IV.36): variation de fraction molaire_O.

La figure (36) représente la variation de la fraction molaire du radical O dans la direction axiale de la chambre de combustion pour différentes valeurs de la pression. **Pour P=0.0329atm**, on remarque une fraction molaire O qui augmente rapidement jusqu'à une valeur maximale de 0.006 pour la distance D=1.5 cm puis diminue progressivement jusqu'à 0.09 ; valeur à laquelle se stabilise la flamme. **Pour P=1atm,** on remarque le même comportement mais avec une valeur maximale de la fraction molaire O d'environ 8.00E-6 pour une distance de D=1.5 cm puis elle diminue progressivement presqu'à épuisement totale de ce radical.

Pour P=5atm, on remarque que la fraction molaire_O augmente rapidement jusqu'à la valeur max 9.00 E-7 pour la même distance D=1.5 cm puis elle diminue progressivement presqu'à épuisement totale de ce produit.

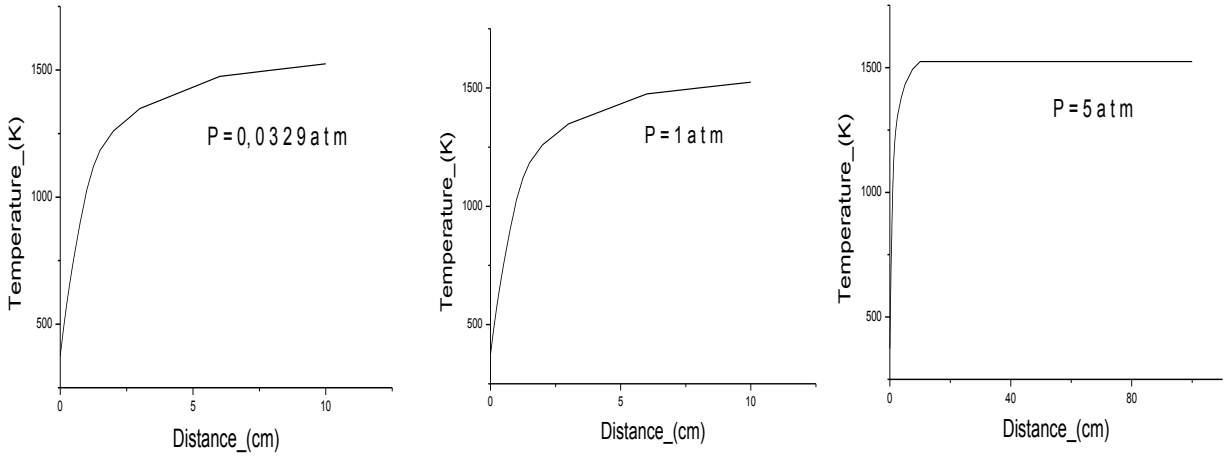


Figure (IV.37): la variation de la température

La figure ci-dessus représente la variation de la température dans la direction axiale de la chambre de combustion pour différentes valeurs de pression (P=0.0329 atm, 1 atm, 5 atm).

On constate des profils de température de même allure : on remarque une augmentation de la température jusqu'à une valeur maximale d'environ 1524 k pour la distance 7.5cm à partir de l'injecteur, puis se stabilise à une valeur constante.

IV.5 .5.2 Effet de la longueur « L » :

Dans cette section, on a mis en évidence l'effet du changement dans la longueur de la chambre de combustion sur la structure de la flamme. On prend une pression fixe « P=0.0329atm »et trois valeurs de la distance « L1=10, L2=30, L3=100 cm ».

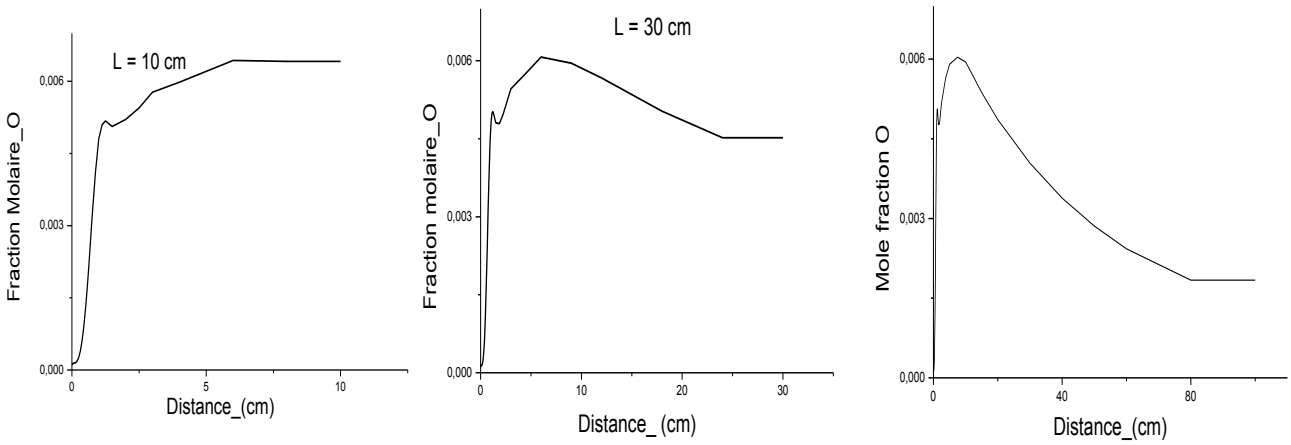


Figure (IV. 38): variation de fraction molaire_O.

La figure représente la variation de fraction molaire d'oxygène en fonction de la distance variable (L=10 cm, 30 cm, 100 cm) pourune pression constante.

Pour L=10 cm, on remarque que la fraction molaire_O augmente rapidement jusqu'à la valeur max 0.06 pour la distance D=1.5 cm puis reste constant.

Pour L=30 cm, on remarque une fraction molaire_O en augmentation rapide jusqu'à la même valeur max 0.006 pour la distance D=1.5 cm puis diminue progressivement jusqu'à 0.0045 pour laquelle la flamme se stabilise à cette valeur constante.

Pour L=100 cm, on remarque que la fraction molaire_O augmente rapidement jusqu'à la valeur max pour la distance D=1.5 cm puis diminue progressivement jusqu'à 0.002puis reste constante.

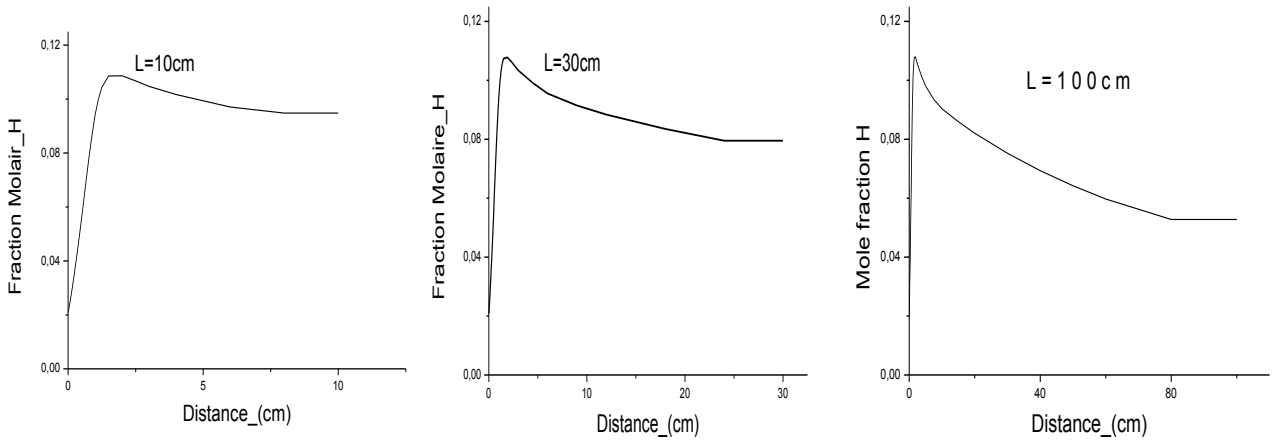


Figure (IV.39): la variation de fraction molaire_H.

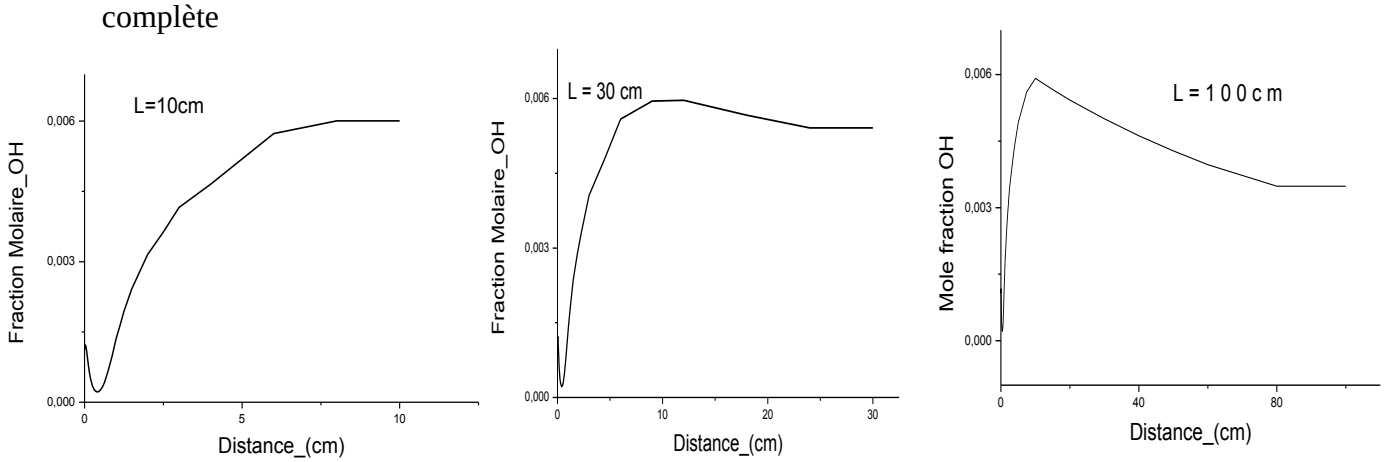
La figure est représenté la variation de fraction molaire d'hydrogène une fonction de la distance variable (L=10 cm, 30 cm, 100 cm) avec la pression constant.

Pour L=10 cm, on remarque la fraction molaire_H est augmentation rapide jusqu'à la valeur max 0.11 pour la distance D=1.5 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.10.est puis reste constant.

Pour L=30 cm, on remarque la fraction molaire_H est augmentation rapide jusqu'à Le même valeur max 0.11 pour la distance D=1.5 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.08.est puis reste constant.

Pour L=100 cm, on remarque la fraction molaire_H est augmentation rapide jusqu'à la valeur max pour la distance D=1.5 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.527.est puis reste constant.

Donc est augmenté la distance la fraction molaire (O, H, OH) diminution, les réactions complète



Figure(IV.40) : La variation de la fraction molaire_OH

La figure est représenté la variation de fraction molaire d'hydrogène une fonction de la distance variable (L=10 cm, 30 cm, 100 cm) avec la pression constant.

Pour L=10 cm, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à la valeur max 0.06 pour la distance D=1.5 cm.est puis reste constant.

Pour L=30 cm, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à Le même valeur max 0.06 pour la distance D=1.5 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.05.est puis reste constant.

Pour L=100 cm, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à la valeur max pour la distance D=1.5 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.035.est puis reste constant.

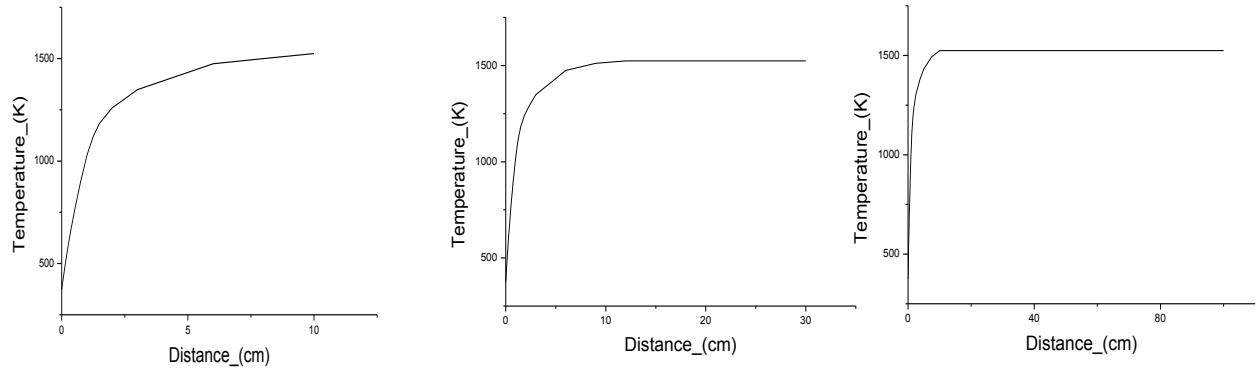


Figure (IV.41): la variation de la température

La figure est représente la variation de la température une fonction de la distance varie (L= 10 cm, 30 cm, 100 cm) et la pression constant (P =0.0329atm).

Les 3 profile sur la figure est donnée le même résulta comme suite : on remarque augmentation la température jusqu'à la valeur max 1524 k pour la distance 7.5cm, est puis reste constant.

IV.5 .5.2 Effet de la Température« T » :

On étudie les variations de la fraction molaire en fonction du la distance, en changeant la température (T=400k, T=700k, T=1000k), la distance et la pression constant (L=10cm, P=0.0329atm).

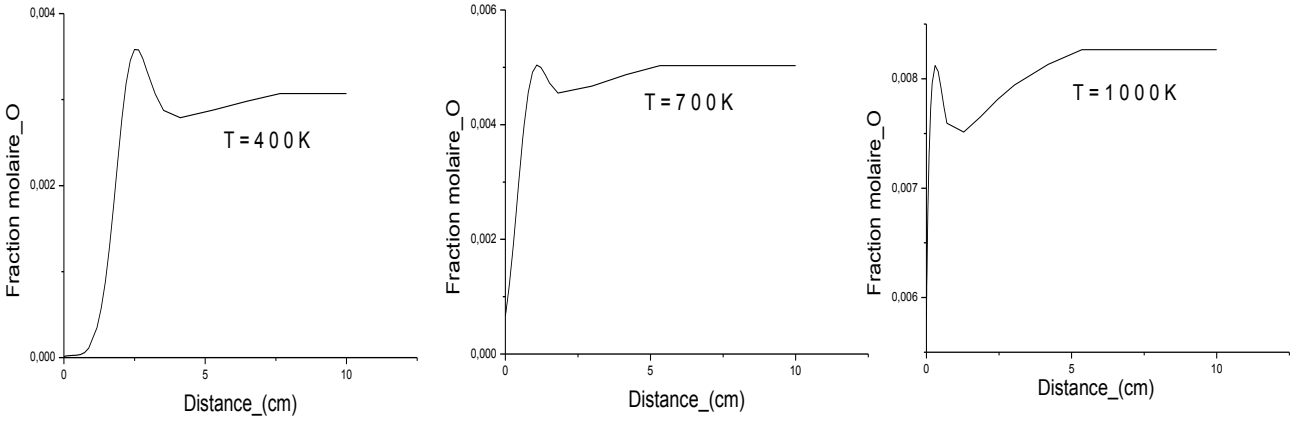


Figure (IV.42): la variation de Fraction molaire_O.

La figure est représenté la variation de fraction molaire d'oxygène une fonction de la distance la pression et la distance fixe et température variable (T=400 K, 700 K, 1000 K).

Pour T=400K, on remarque la fraction molaire_O est augmentation rapide jusqu'à la valeur max 0.0035pour la distance D=2.5 cm.et vibration jusqu'à 0.003.est puis reste constant.

Pour T=700K, on remarque la fraction molaire_O est augmentation rapide jusqu'à Le même valeur max 0.0082 pour la distance D=0.3 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.0045.et augment pour reste constant.

Pour T=1000K, on remarque la fraction molaire_O est augmentation rapide jusqu'à la valeur max 0.008pour la distance D=0.2 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.035.et augment pour reste constant.

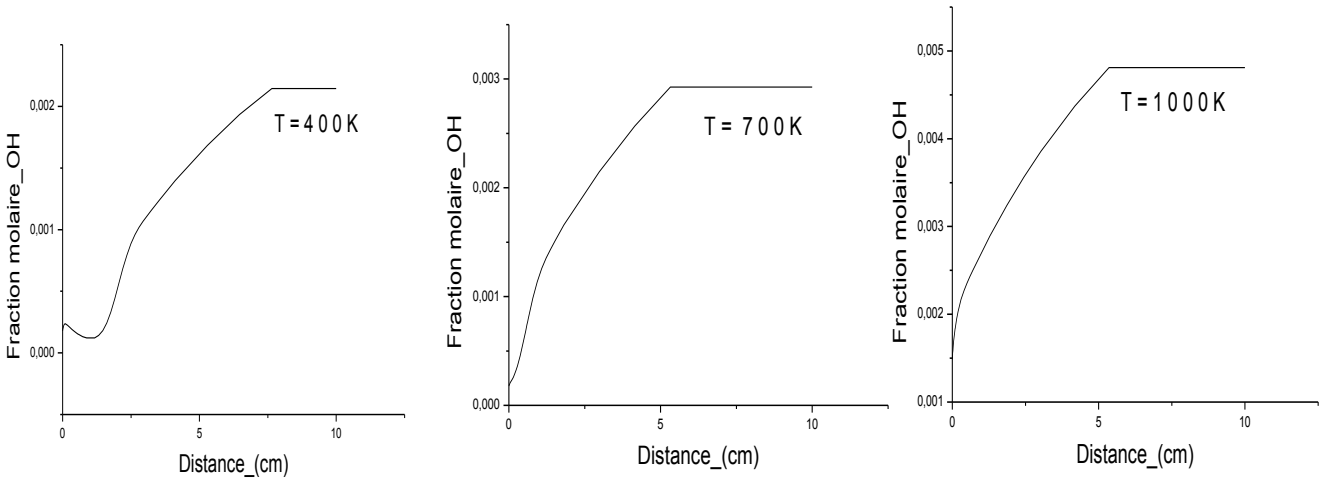


Figure (IV.43): la variation de Fraction molaire_OH

La figure est représenté la variation de fraction molaire_OH une fonction de la distance la pression et la distance fixe et température d'entrée variable (T=400 K, 700 K, 1000 K).

Pour T=400K, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à la valeur max 0.002 pour la distance D=7.65 cm. Et diminue est puis reste constant.

Pour T=700K, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à Le même valeur max 0.002 pour la distance D=5.32 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.005.est puis reste constant.

Pour T=1000K, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à la valeur max pour la distance D=5.35 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.0048.est puis reste constant

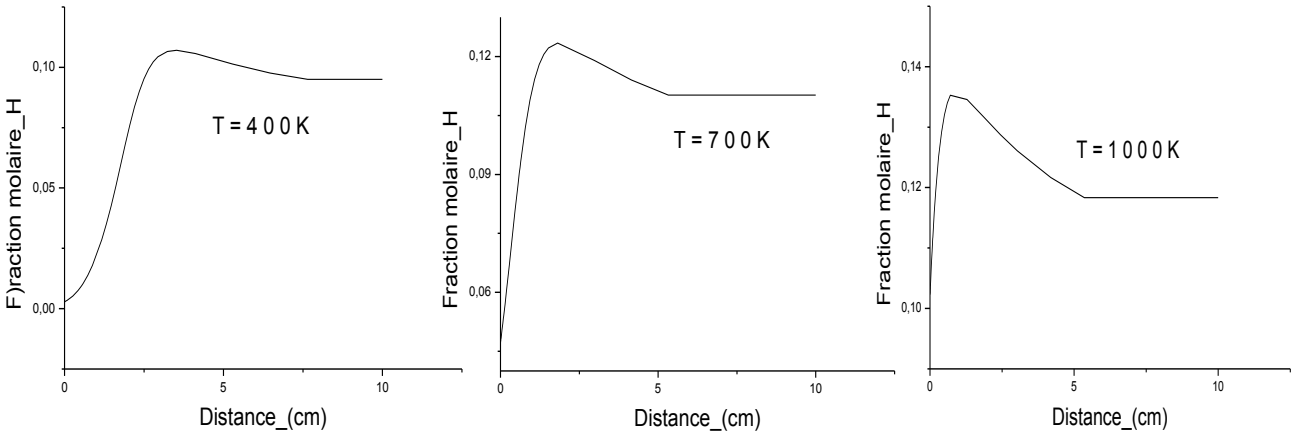


Figure (IV.44): la variation de Fraction molaire_H

La figure est représenté la variation de fraction molaire d'hydrogène une fonction de la distance la pression et la distance fixe et température variable (T=400 K, 700 K, 1000 K).

Pour T=400K, on remarque la fraction molaire_O est augmentation rapide jusqu'à la valeur max 0.1 pour la distance D=3.52 cm.est puis reste constant.

Pour T=700K, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à Le même valeur max 0.012 pour la distance D=1.81 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.011.est puis reste constant.

Pour T=1000K, on remarque la fraction molaire_OH est augmentation rapide jusqu'à la valeur max0.135 pour la distance D=0.7 cm.et puis diminution progressivement jusqu'à 0.118.est puis reste constant

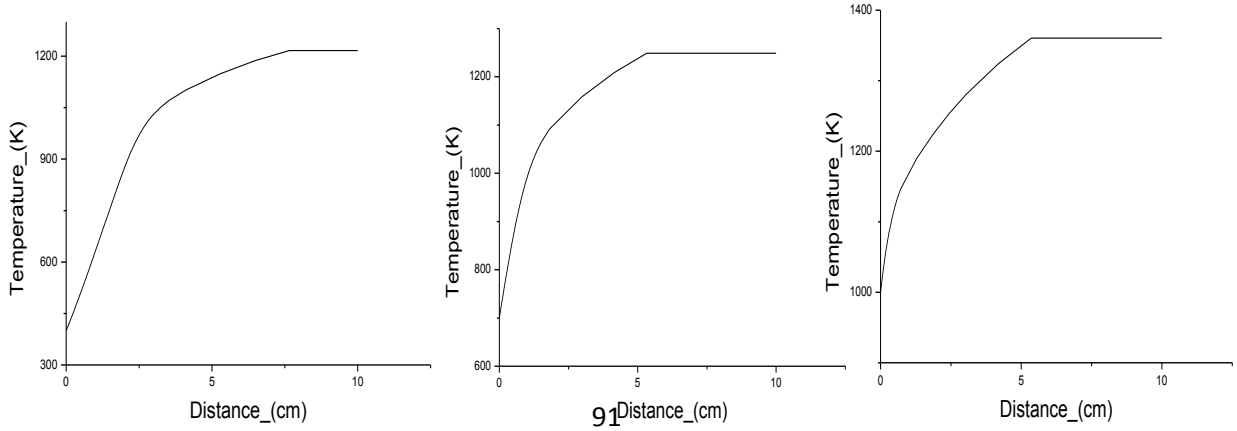


Figure (IV.45): la variation de la température.

La figure est représenté la variation de la température une fonction de la distance la pression et la distance fixe et température variable (T=400 K, 700 K, 1000 K).

La figure est représenté la variation de fraction molaire d'hydrogène une fonction de la distance la pression et la distance fixe et température variable (T=400 K, 700 K, 1000 K).

On remarque est augmente la température la fraction molaire_OH et augment.

Conclusions generales

La compréhension du comportement des écoulements réactifs,en particulier, les flammes turbulentes, est un enjeu très essentiel dans l'industrie d'aujourd'hui.

L'objectif de la recherche dans le domaine des flammes, c'est de concevoir des systèmes énergétiques qui rependent aux exigences économiques mais qui doivent être soumis aux contraintes environnementales. Le but est alors de concevoir des systèmes qui consomment moins d'énergie et qui donnent plus de rendement, sans nuire à l'environnement.

Dans ce contexte, le présent travail fait l'objet d'une étude numerique de la stabilisation des flammes de bruleur.Son but est de prédire le comportent de la flamme de ce dernier. Pour se faire, on a choisi le code CHEMKIN PROutilisant deux modèles :Reflected Shock et Pré-mixed Burner.

Les cas traités dans cette étude sont :

1- La Flamme de diffusion pour la combustion d'hydrogène avec l'oxygène et celle avec de l'air en utilisant le modèle Reflected-Shock

2-Flamme de diffusion pour la combustion d'hydrogène avec l'oxygène en utilisant le modèlePré-mixed.

Dans la comparaison entre la combustion d'hydrogène avec de l'oxygène et celle avec de l'air,on a remarqué que la flamme dans la combustion avec l'oxygène atteint des températures nettement plus élevées que celle avec de l'air ; ce qui nécessite l'intégration de systèmes de refroidissement performant. De plus, cette flamme est plus rapide et moins polluante en générant moins de radicaux O, H et OH tandis que celle en présence de l'air produit, en plus du O, H, OH, du NO qui peut présenter une attaque polluante à fil du temps par accumulation.

D'autre part, l'augmentation dans la pression et température d'entrée permettent une meilleure stabilisation à la flamme si on augmente la longueur de la chambre de combustion. Un problème de poids peut s'impose comme compromis.

À la fin de ce travail, nous espérons être utile en contribuant à l'enrichissement de la bibliothèque de l'université par la presentation d'un outil performant comme Chemkin dans le domaine de la cinetique des reactions et caracterisation des flammes.