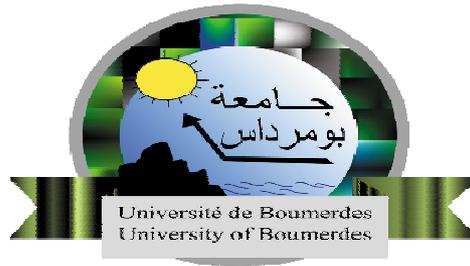


N° Ordre..... /DGM/FSI/UMBB/2018

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE M'HAMED BOUGARA BOUMERDES
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGENIEUR
DEPARTEMENT GENIE MECANIQUE



MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

En vue de l'obtention du diplôme de **MASTER** en

Filière : **Energies renouvelables**

Spécialité : **Energie Renouvelable en Mécanique**

Thème

***Etude numérique du fonctionnement d'un moteur à
combustion interne alimenté en gaz Naturel -Hydrogène***

Réaliser par :

BEGHDADI Mohamed Seghir

CHEBAB Mohamed Lamine

Promoteur :

Mr. HACHEMI Madjid

Mme. BELACEL Mounia

Année universitaire : 2017/2018

Résumé

Résumé :

La majeure partie de l'énergie produite et utilisée dans le monde provient des énergies fossiles. Ces combustibles provoquent l'émission de quantités importantes de gaz à effet de serre ainsi que différents types de polluants comme le CO, les NOx et d'autres particules polluantes. Afin de réduire ces émissions, l'ajout d'hydrogène dans les hydrocarbures semble être une voie prometteuse. De plus, plusieurs auteurs ont démontrés que l'ajout d'une proportion d'hydrogène adéquate dans les hydrocarbures améliore les performances de la combustion (meilleure stabilité des flammes, réduction de la pollution, etc.). L'hydrogène étant un bon vecteur énergétique, son ajout aux hydrocarbures pourrait être également un bon moyen pour l'introduction des énergies renouvelable.

Dans ce travail il a été question d'étudier l'effet d'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulent, le carburant utilisé dans cette flamme est un mélange de méthane et d'hydrogène qui varie entre 0% et 50% ; la simulation de la combustion turbulente d'hydrogène/méthane non pré-mélangé ont été obtenus à l'aide du code fluent, en utilisant le modèle de combustion PDF et de la turbulente k- ϵ , et le schéma cinétique GRIMech 3.0.

Les résultats montrent que l'ajout d'hydrogène provoque une réduction des expansions radiale et axiale de la flamme avec une réduction de la zone de réaction. IL conduit également à une augmentation de la température de combustion, ce qui induit un accroissement des émissions de monoxyde d'azote, le mécanisme de Zel'dovich devient plus important par rapport à celui de Fenimore, et une réduction de la production de CO.

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

Abstract

Most of the energy produced and used in the world comes from fossil fuels. These fuels cause the emission of significant quantities of greenhouse gases as well as different types of pollutants such as CO, NOx and other particulate pollutants. In order to reduce these emissions, the addition of hydrogen to hydrocarbons seems to be a promising way forward. In addition, several authors have demonstrated that adding an adequate proportion of hydrogen to hydrocarbons improves combustion performance (better flame stability, reduced pollution, etc.) Since hydrogen is a good energy carrier, its addition to hydrocarbons could also be a good way to introduce renewable energies.

Résumé

In this work it was discussed to study the effect of hydrogen on a turbulent diffusion flame, the fuel used in this flame is a mixture of methane and hydrogen that varies between 0% and 50%; the simulation of turbulent combustion of hydrogen/methane not premixed was obtained using the fluent code, using the PDF combustion model and the turbulent k- ϵ , and the kinetic diagram GRIMEch 3.0.

The results show that the addition of hydrogen reduces the radial and axial expansion of the flame with a reduction in the reaction zone. It also leads to an increase in combustion temperature, which leads to an increase in nitric oxide emissions, the Zel'dovich mechanism becomes more important than that of Fenimore, and a reduction in CO production.

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

ملخص

معظم الطاقة المنتجة و المستخدمة في العالم تأتي من الوقود الاحفوري. بسبب هذا الوقود انبعاث كميات كبيره من غازات الدفيئه و كذلك انواع مختلفه من الملوثات مثل ثاني اوكسيد الكربون و اكاسيد النيتروجين و الجسيمات الملوثه الاخرى من اجل تقليل هذه الانبعاثات يبدو انا اضافه الهيدروجين الى الهيدروكربونات خيار واعد. بالاضافه الى ذلك اثبتت العديد من الباحثين انا اضافه نسبه كافيه من الهيدروكربونات يحسن من اداء الاحتراق (استقرار اللهب و الحد من التلوث ... الخ) الهيدروجين هو ناقل جيد للطاقة و يمكن ان تكون اضافه الهيدروكربونات ايضا طريقه جيده لادخال الطاقات المتجدده.

في هذا العمل كنا قد خضعنا لدراسه تاثير الهيدروجين على انتشار اللهب المضطرب و الوقود المستخدم في هذه الشعلة هو خليط من غاز الميثان و الهيدروجين و التي تتراوح ما بين 0% و 50% تم الحصول على محاكاة الاحتراق المضطرب من الهيدروجين و

الميثان غير المخلوط باستخدام رمز بطلاقه و ذلك باستخدام نموذج الاحتراق و pdf المضطرب k- ϵ .
الحركيه مخطط GRIMEch 3.0.

اظهرت النتائج ان اضافه الهيدروجين يؤدي الى انخفاض في التوسعات الشعاعيه و المحوريه للهب مع انخفاض في منطقه التفاعل. يؤدي ايضا الى زياده درجه حراره الاحتراق مما يؤدي الى زياده في انبعاثات اكسيد النيتريك و اليه زولدوفيش تصبح اكثر اهميه مقارنة فنيومور و انخفاض في انتاج احادي اكسيد الكربون.

الكلمات المفتاحيه: الاحتراق المضطرب ; المحاكاه العدديه; لهب الانتشار المضطرب; الاثراء بالهيدروجين.

Remerciements

*Avant de présenter ce travail, nous tenons à remercier tout d'abord le **Dieu** tout puissant, de nous avoir permis d'arriver à ce niveau d'étude, et aussi pour nous avoir donné beaucoup de patience et de courage sans oublier nos **parents** qui n'ont lésiné sur aucun problème pour nous apporter toute l'aide nécessaire pour atteindre ce niveau qui nous permettra d'assurer notre avenir.*

*A travers cette modeste thèse nous tenons à présenter nos sincères remerciements et notre profonde reconnaissance à notre Promoteur **Mr. HACHEMI Madjid**, d'avoir accepté de superviser ce travail et pour sa précieuse aide tant au niveau de son encadrement qu'au niveau de sa disponibilité qu'il nous a accordé dans la réalisation de ce travail. Nous adressons également nos remerciements à aux membres du jury d'avoir accepté de juger notre travail.*

*Nous souhaitons également remercier le « **centre de développement des Energies Renouvelables à Bouzaréah - Alger** » et particulièrement notre promotrice **Mme. BELACEL Mounia**, pour l'aide, les explications pertinentes, et les conseils précieux, et aussi le temps qu'il a bien voulu nous consacrer durant le stage, qui ont le grand impact dans la réussite du projet réalisé.*

*Nous adressons nos sincères reconnaissances à tous les enseignants du département **génie mécanique** de l'Université **M' HAMED BOUGHARA** à Boumerdès qui nous ont donnés les bases de la science pendant les cinq ans de notre formation.*

Enfin, Nous tenons à remercier toutes les personnes qui m'ont apporté leur aide de près ou de loin tout au long de l'élaboration de ce mémoire.



Dédicaces

A ma mère et mon père

A mes très chers parents, en témoignage et en gratitude de

*leur soutien permanent durant toutes mes années d'études, leurs sacrifices
illimités, leur réconfort moral*

*et tous les efforts qu'ils ont consentis pour mon éducation et
mon instruction pour me voir réussir un jour.*

Que Dieu les garde.

A Mon frère : Abdellah;

et Mes sœurs : Dalel ; Khalida ; Meriem ; Amina

A mes adorables petites nièces « Zineb » et « Hadjer » les chouchous de la famille.

A mon binôme Baghdadi Madjid ;

A tous les étudiants option Energie renouvelable promotion 2018

A tous je dédie ce travail.

CHEBAB Mohamed Lamine





Dédicaces

A ma mère et mon père

*A mes très chers parents, en témoignage et en gratitude de
leur soutien permanent durant toutes mes années d'études, leurs sacrifices
illimités, leur réconfort moral
et tous les efforts qu'ils ont consentis pour mon éducation et
mon instruction pour me voir réussir un jour.*

Que Dieu les garde.

A Ma grande mère : Tassadit ;

A Mon frère : Amar; Farid;

Et Mes sœurs : Samira; Fazia ; Aziza.

A Tous ma famille BEGHDAI.

A mon binôme CHEBAB Mohamed Lamine;

A tous mes chers amis.

A tous les étudiants option Energie renouvelable promotion 2018

A tous je dédie ce travail.

BEGHDAI Mohamed Seghir



Sommaire

Listes des figures

Nomenclatures

Introduction générale.....1

CHAPITRE I : synthèse bibliographique

I.1. Etat de l'art3

Chapitre II : Généralité et notion fondamentale sur MCI

II.1. Introduction.....7

II.2. Principe de fonctionnement d'un moteur à combustion interne7

II.2.1. Cycle à deux temps8

II.2.2. Cycle à quatre temps8

II.3. Différents types des moteurs à combustion interne10

II.3.1. Moteur à allumage par compression (à diesel).....10

II.3.2. Moteur à allumage commandé(à essence)10

II.3.3. Moteur à gaz naturel11

II.3.3.1. Composition chimique du gaz naturel.....12

II.3.3.2. Avantage d'utilisation du gaz naturel12

II.3.3.3. Techniques de combustion du GN dans les moteurs13

II.3.3.3.1. Moteurs stœchiométriques au gaz naturel.....13

II.3.3.3.2. Moteur au gaz naturel en mélange pauvre13

II.3.4. Moteur à mélange gaz naturel / gazole14

II.3.5. Moteur à hydrogène14

II.3.5.1. Combustion de l'hydrogène.....15

II.3.5.2. L'hydrogène dans les moteurs à combustion interne.....15

II.3.6. Moteur à mélange hydrogène/hydrocarbure.....17

II.3.7. Moteur à mélange hydrogène /gaz naturel18

II.3.7.1. Les caractéristiques de gaz naturel e de l'hydrogène.....20

Chapitre III : structure de la flamme

III.1. Introduction.....21

III.2. Définition d'une flamme.....22

III.3. Combustion laminaire.....24

III.3.1. Flamme laminaire pré-mélangée	24
III.3.2. Flamme laminaire non pré mélangée	26
III.4. Combustion turbulent	26
III.4.1. Combustion pré-mélangée turbulente.....	26
III.4.2. Flamme turbulente non- pré-mélangée	27

Chapitre IV : Modélisation physique d'une flamme de diffusion turbulent

IV.1. Introduction.....	29
IV.2. Equations de conservation pour les écoulements réactifs	29
IV.2.1. Equation de conservation de la masse	29
IV.2.2. Equation de conservation des espèces chimique	29
IV.2.3. Equation de la quantité de mouvement	30
IV.2.4. Equation de conservation de l'énergie	30
IV.3. Modèle de combustion	31
IV.3.1. Modèle "Eddy Break-Up"	31
IV.3.2. modèle EDM (Eddy Dissipation Model)	30
IV.3.3. Modèles en fonction de densité de probabilité PDF	32
IV.3.3.1. Approche par la PDF présumée	32
IV.3.3.2. Approche par la fonction de densité de probabilité PDF transporté.....	33
IV.4. Modèle de turbulence k-ε	34
IV.5. Modélisation de la turbulence	35
IV.5.1. Simulation numérique directe (DNS)	36
IV.5.2. Simulation numérique des grandes échelles (LES)	36
IV.5.2.1. Fermetures du premier ordre	37
IV.5.2.2. Fermetures du second ordre.....	37
IV.5.3. Equations de Navier-Stokes moyennes	38

Chapitre V : Modalisation numérique sous Fluent

V.1. Introduction	39
V.2. Définition du Gambit –Fluent	39
V.2.1. Architecture du logiciel	40
V.3. Géométrie du problème	42
V.3.1. Conception de la géométrie et génération de maillage	42
V.4. Définition des conditions aux limites.....	43

Chapitre IV Résultats et discussions

VI.1. Introduction	46
VI.2. Résultats et discussions	46
VI.2.1. L'effet de l'ajout de l'hydrogène sur la température de combustion.....	46
VI.2.2. Les profils de température pour des différents pourcentages d'hydrogène	48
VI.2.3. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la vitesse d'écoulement flamme	49
VI.2.4. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique de méthane et d'hydrogène.....	50
VI.2.5. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique de CO.....	51
VI.2.6. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique de NO	52
VI.2.7. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique d'OH	53
Conclusion générale	54

Références bibliographiques

Annexes

Listes des figures :

Figure. II.1. Les principes composant d'un moteur à piston à 4 cylindres.....	7
Figure. II.2. Moteur à combustion interne à 2 temps	8
Figure. II. 3. Le cycle de 4 temps pour le moteur à combustion interne.....	10
Figure. II.7. Les émissions de CO ₂ sur le site selon le type carburant.....	11
Figure. II. 8. Moteur à hydrogène sur BMW 2015.....	15
Figure. II.9. Utilisation de l'hydrogène dans les moteurs à combustion interne.....	18
Figure. III. 1. Types de flamme : (a) pré-mélangée, (b) non pré-mélangée.	23
Figure. III. 2. différents systèmes pratiques de combustions classées selon le type d'introduction des réactifs (pré-mélangée ou non)et la nature laminaire ou turbulente de l'écoulement.....	24
Figure. III. 3. Structure d'une flamme laminaire pré mélangée).....	25
Figure. III. 4. Structure d'une flamme laminaire de diffusion.....	26
Figure. III. 5. Flamme de diffusion faiblement turbulente.....	28
Figure.III. 6. Interaction à grande échelle de flammelettes.....	28
Figure. IV. 1 Aperçu sur les différents modèles de turbulence.....	35
Figure. V.1. Domaine application de CFD.....	39
Figure. V.1. Présentation des éléments du logiciel.....	41
Figure. V.3. La géométrie de la configuration.....	42
Figure. V.4. Aperçue du maillage utilisé.....	43
Figure. V.5. Maillage de la géométrie.....	44
Figure. VI.1. les iso-contours de la température de la flamme pour les différents pourcentages de l'hydrogène.....	47
Figure. VI.2. Les profils de température en fonction de la distance axiale pour différentes concentrations d'H ₂	48
Figure. VI.3. Les profils de la vitesse pour différentes pourcentages d'H ₂	49
Figure. IV.4. Les fractions massiques de méthane pour les différents pourcentages d'H ₂	50
Figure.VI.5. Les fractions massiques de l'hydrogène pour les différents pourcentages d'H ₂ .	50
Figure.VI.6. Les fractions massiques de CO pour les différents pourcentages d'H ₂	51
Figure.VI.7. La fraction massique de NO pour les différents pourcentages d'H ₂	52
Figure VI.8. Les fractions massiques d'OH pour les différents pourcentages d'H ₂	53

Liste des tableaux :

Tableau. II. 1. Les émissions des polluants toxiques en fonction de l'ajout d'hydrogène dans le gaz naturel.....	19
Tableau. II. 2. Les caractéristiques physico-chimiques de gaz naturel et de l'hydrogène.....	20
Table. IV.1. Constantes du modèle k-ε standard.....	34
Tableau. V.1. Les conditions aux limites sous Gambit.....	44.

NOMENCLATURE :

C_p	Capacité calorifique à pression constante	[J/kg K]
Da	Nombre de Damköhler	[–]
F_i	Forces de volume	[N]
h_k	Enthalpie spécifique de l'espèce k	[J/kg]
K	Energie cinétique turbulente	[J/kg]
N	Nombre d'espèce	[–]
P	Pression statique	[Pa]
\dot{Q}	Source de chaleur	[–]
Re	Nombre de Reynolds	[–]
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent	[–]
V	Vitesse de l'écoulement des gaz	[m. s ⁻¹]
S_L	Vitesse fondamentale de combustion	[m/s]
S_L^0	Vitesse fondamentale de combustion non étirée	[m/s]
W_k	Taux de production de l'espèce k	[mole/(m ³ . s)]
$V_{k,i}$	Vitesse de diffusion de l'espèce k dans la direction i	[$\frac{m}{s}$]
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	[–]
u_i	Vitesse dans la direction i	[m/s]

Lettres grecques :

ρ	Masse volumique du mélange gazeux	[g. m ⁻³]
μ	Viscosité dynamique	[g. m ⁻¹ . s ⁻¹]
λ	Conductivité thermique du mélange réactif	[W. m ⁻¹ . K ⁻¹]
ρ_f	Masse volumique du mélange frais	[kg/m ³]
δ_L	Épaisseur de la flamme laminaire (Zeldovich)	[m]
δ_{ij}	Tenseur de la contrainte dans le plan i et la direction j	[N/m ²]

ν	Viscosité cinématique	$e[m^2/s]$
τ_t	Echelle de temps caractéristique de la turbulence	$[s]$
η	Micro échelle spatiale de Kolmogorov	$[m]$
τ_c	Echelle de temps caractéristique de la réaction chimie	$[s]$
ε	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$[m^2/s^3]$
τ_{ij}	Tenseur des forces visqueuses	$[N/m^2]$
$\dot{\omega}_t$	Taux de dégagement de chaleur due à la réaction	$[J/(m^3s)]$
$\dot{\omega}_k$	Taux de production de l'espèce k	$[mole/(m^3s)]$

Abréviations :

MCI	Moteur à combustion interne
PMH	Point Mort Haut
PMB	Point Mort Bas
GN	Gaz Naturel
EBU	Eddy Break Up (modèle)
PDF	Probability Density Function
EDM	Eddy Dissipation Model
CFD	Computational Fluid Dynamics

Chimie :

H_2	Hydrogène
CH_4	Méthane
CO	Monoxyde de carbone
NO_x	Les oxydes d'azote
NO	Mono-oxyde d'azote
OH	Hydroxyde

Introduction générale

Introduction générale

Le secteur de l'énergie est actuellement confronté à deux problèmes majeurs de crise énergétique et de dégradation de l'environnement. La pollution atmosphérique et le réchauffement climatique provoqué par les émissions de gaz à effet de serre sont devenus une préoccupation et un enjeu majeur dans le monde entier ; Le secteur du transport constitue de nos jours un intérêt majeur du point de vue énergie et environnement, étant donné que c'est le secteur le plus énergivore et le plus émetteur de gaz à effet de serre responsable du réchauffement climatique. Les lois restrictives sur les émissions nocives ont motivés la recherche de nouvelles ressources d'énergies propres et renouvelables. Aujourd'hui, les constructeurs automobiles cherchent à concevoir des moteurs répondant à des normes de pollution et de bruit de plus en plus sévères, tout en continuant à améliorer leurs performances. avec l'amélioration des systèmes de combustion actuels et l'utilisation des combustibles propres d'origine renouvelable telle que l'hydrogène .De nombreuses études sont donc réalisées sur les moteurs à allumage commandé et à allumage par compression afin de mieux décrire la phase de combustion.

La combustion dans les moteurs génère des produits nocifs pour l'homme : monoxyde de carbone CO, oxydes d'azote NO et hydrocarbures imbrûlés parmi lesquels on trouve les hydrocarbures aromatiques polycycliques H.A.P. particulièrement toxiques ... Elle contribue également au phénomène connu sous le terme "effet de serre", en rejetant une quantité importante de dioxyde de carbone CO₂, produit final de la combustion. Un grand nombre de travaux de recherche ont été menés dans le but d'identifier des sources d'énergie de substitution plus écologiques que les produits pétroliers conventionnels. Le gaz naturel enrichi à l'hydrogène bénéficie d'un grand intérêt en tant que carburant alternatif propre. Son utilisation dans les moteurs et particulièrement ceux de véhicules est investiguée.

En conséquence, les normes pour lutter contre la pollution sont de plus en plus strictes afin de faire face au problème de changement climatique et pollution d'air. La recherche et l'industrie automobile doivent ainsi chercher des solutions technologiques pour réduire les émissions polluantes avec des recherches nouvelles carburant qui est propre et non nocif telle que l'hydrogène.

C'est dans cet objectif que ce travail de mémoire a été initié, l'utilisation future de carburant de substitution comme l'hydrogène est la seule solution durable pour protéger le climat et assurer l'approvisionnement énergétique mondial du secteur du transport à long terme.

Le manuscrit est organisé en six chapitres, une annexe, complété par une introduction et une conclusion générales.

Introduction générale

- ✓ Les chapitres I et II seront consacrés à la synthèse bibliographique sur l'enrichissement de l'hydrogène à des carburants et plus spécifiquement du méthane. Un ensemble de travaux seront porté sur les différents systèmes de conversion d'énergie tels que les moteurs à combustion interne,
- ✓ Chapitres III et VI seront dédiés à la modélisation d'une flamme de diffusion turbulente avec ses différents aspects. Pour cela, nous présenterons un aperçu sur la stabilisation d'une flamme de diffusion turbulente, et une revue des outils mathématiques nécessaires à cette modélisation, les différents modèles de turbulence disponibles dans la littérature ainsi que les approches de couplage entre la chimie et la turbulence seront présentés, avec un taux d'hydrogène volumique, qui varié entre 0 et 50 %. Notre intérêt a porté sur l'effet de l'hydrogène sur la structure de la flamme, la température de combustion, les émissions de monoxyde et de dioxyde de carbone,
- ✓ Pour le Chapitre V sera dédié à la présentation des logiciels utilisés GAMBIT – FLUNENT,
- ✓ Pour la dernière partie de cette étude qui constituera le VI chapitre, nous exposerons les différentes résultats du calcul numérique, l'effet de l'ajout d'hydrogène sur les températures de combustion et sur les fractions massiques tels que : NO, CO, OH et CH₄ et H₂.

Chapitre I

Synthèse bibliographique

I. Etat de l'art :

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

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

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

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

S.R. BELL et M.GUPTA [1] ont fait une étude très intéressante sur les performances, les émissions et les caractéristiques des mélanges pauvres du gaz naturel et de l'hydrogène dans les moteurs à allumage commandé. Un taux d'hydrogène de 5, 10 et 15% a été ajouté au gaz naturel. Ils ont trouvé que pour des richesses inférieures à 0.8 les améliorations de la puissance, l'efficacité thermique et la consommation sont significatives. Ces auteurs ont noté également une extension des limites pauvres (richesses d'extinction) avec l'ajout de l'hydrogène. Les émissions de CO et NOx ont diminué avec diminution de la richesse ; le fonctionnement du moteur est stable et l'impact de la fraction d'hydrogène ajouté n'est pas linéaire.

Une autre étude numérique par J.L.GAUDUCHEAU et al [2] a essayé d'expliquer le phénomène d'extension des limites pauvres lors de l'enrichissement par l'hydrogène. Selon les auteurs, l'ajout de l'hydrogène à richesse globale constante augmente la résistance de la flamme à l'étirement. Les autres propriétés telles que le temps d'ignition et la température adiabatique de combustion se trouvent peu modifiées. Bell et Gupta (1997) ont récemment

constaté que l'ajout d'hydrogène augmente la léthargie des moteurs à gaz naturel, entraînant une réduction potentielle de la composition des polluants.

En 2000 F. Harouadi et S. Boulahrouz [3] ont fait une étude et une analyse sur la Combustion Turbulente dans un Moteur Alimenté en Gaz Naturel. Ils ont utilisé La modélisation aérodynamique de la flamme turbulente dans un moteur alimenté en gaz naturel, pour deux mélanges distincts (un mélange relativement riche, et un mélange pauvre) a montré que : Les vitesses laminaire et turbulente de la flamme dépendent fortement du niveau de turbulence (régime moteur) et de la richesse du mélange.

Une étude expérimentale et numérique est faite par GREGORY S. et al [4] pour connaître l'effet de l'hydrogène sur la réponse des flammes pré-mélangées pauvres de méthane aux forts étirements (jusqu'à 8000 s^{-1}) induits par l'écoulement. La plage de richesse investiguée est de moins de 0.4 à 0.75. Les auteurs ont montré que l'ajout de l'hydrogène augmente la vitesse de la flamme et par conséquent son taux d'étirement maximal qui provoque l'extinction. Ces auteurs ont également noté le faible impact de la richesse d'extinction sur le taux d'étirement de l'écoulement, et la dépendance de la température d'extinction sur la richesse et non pas sur la composition du mélange.

F. Tabet-Helal et al [5] ont étudié par simulation numérique les caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente avec co-courant d'air de méthane enrichie avec de l'hydrogène. La configuration adoptée est constituée d'un mélange de méthane et d'hydrogène dilué dans de l'azote. La turbulence est modélisée avec l'approche RSM (Reynolds Stress Model) et l'interaction chimie turbulence est représentée par le modèle EDC (Eddy Dissipation Concept). Les résultats nous indiquent que l'outil numérique est apte à reproduire les caractéristiques de la flamme (longueur, épaisseur et maximum de température).

Plusieurs autres études, les plus parts numériques, traitant l'effet de l'ajout d'hydrogène sur les caractéristiques de propagation des flammes de méthane existent dans la littérature. On peut citer par exemple les travaux de B. Boumeddane et al [6], qui ont fait une étude numérique de l'auto-inflammation des mélanges méthane/air en mode HCCI. Ils affirment que l'addition d'hydrogène au méthane a un effet sur la réduction de la pollution.

Une étude numérique de la combustion par Abdelbaki Mameri [7] a fait l'objet d'un travail de recherche qui vise à améliorer la connaissance et la compréhension des phénomènes mis en jeu lors d'un processus de combustion turbulente en milieu pré-mélangé. Le but était de

caractériser l'effet de la richesse et l'ajout de l'hydrogène sur la combustion turbulente du mélange pauvre méthane/air. Comme résultat il a trouvé que l'ajout de l'hydrogène augmente la réactivité du mélange et par conséquent la vitesse de la flamme turbulente ce qui diminue la longueur de la flamme.

Lotfi Ziani et al[8] ont présenté une étude consacrée à la combustion turbulente non pré-mélangée avec l'approche PDF en utilisant trois modèles de turbulence : le modèle k- ϵ , le modèle k-modifié et le modèle RSM.L'évaluation ne conclut que le k-modifié est le plus approprié pour simuler ce type de flamme. Une étude de l'effet de l'addition d'hydrogène sur la combustion du méthane est effectuée. L'addition d'hydrogène provoque l'élévation de la température de combustion, la diminution des fractions massiques de CO et de CO₂ mais conduit à l'augmentation de la fraction massique de NO.

Mohamed Boukhelef et al [9] ont présenté une étude numérique des conditions d'injection du carburant (H₂) et du comburant sur la structure de la flamme de diffusion H₂-Air. Le but étant de reproduire un cas pratique d'une combustion non polluante et donnant lieu à des températures très élevées (de l'ordre de 2000 K). La configuration étudiée est composée de deux jets coaxiaux axisymétriques, tel qu'on peut rencontrer dans les brûleurs de diffusion. Une approche par fonction de densité de probabilité (PDF) présumée est utilisée pour décrire l'interaction chimie-turbulence. Un modèle de turbulence à deux équations de type K-Epsilon est utilisé dont les deux gaz sont considérés comme gaz parfait.

Alliche Mounir et al [10] ont réalisé une simulation numérique d'une flamme turbulente non pré-mélangée de méthane-air enrichie en hydrogène. La configuration axisymétrique choisie est composée d'un injecteur central de mélange méthane-hydrogène entouré d'un corps bluff entouré d'un jet d'air coaxial. Le logiciel Ansys CFX est utilisé pour résoudre les équations régissant les écoulements réactifs turbulents (moyenne de Navier Stokes). La turbulence est modélisée en utilisant le modèle k- ϵ . L'EDM (Eddy Dissipation model), puis le modèle FRC (Finite Rate Combustion) associé à l'EDM sont utilisés pour modéliser les phénomènes de combustion. Les résultats montrent une certaine concordance avec le profil de température donné par l'expérience à un taux d'hydrogène de 50%.

Khaladi Fatma Zohra et al [11], ont effectué des simulations numériques de la flamme turbulente non pré-mélange de l'air méthane enrichi en hydrogène. La configuration axiale sélectionnée est constituée d'un injecteur central pour le mélange méthane-hydrogène entouré d'un corps d'attraction entouré d'un flux d'air axial commun. Analyse CFX est utilisé pour

résoudre des équations d'interactions volatiles (moyenne de Navier Stokes dans le sens de Favre). Le modèle de perturbation a été conçu en utilisant le modèle k- ϵ . Les résultats montrent une certaine compatibilité avec la température donnée par l'expérience de 50% d'hydrogène.

Il faut noter qu'à travers la lecture des travaux cités en référence dans ce chapitre que ces études démontrent non seulement le potentiel d'utilisation de l'hydrogène mais qu'en dessous d'un certain seuil d'hydrogène dans le gaz naturel, le mélange peut être utilisé dans les infrastructures actuelles sans nécessiter une quelconque modification. Ces seuils dépendent des normes appliquées dans chaque pays ou unions économiques.

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

Chapitre II

Généralité et notion fondamental sur MCI

II.1. Introduction :

On appelle moteur à combustion interne, les moteurs où la combustion se produit à l'intérieur du corps de celui-ci. Le moteur à combustion interne est une machine thermique qui convertit l'énergie chimique du combustible en énergie mécanique, généralement sous forme d'un mouvement rotatif d'un arbre en procédant par une combustion du combustible. Le moteur à explosion transforme en énergie mécanique l'énergie qui provient de la combustion du mélange air/carburant. L'air est composé majoritairement d'azote auquel s'ajoute l'oxygène.

II.2. Principe de fonctionnement d'un moteur à combustion interne :

Un moteur est généralement constitué d'un nombre de pistons qui montent et descendent dans leurs cylindres respectifs ((4 pistons dans notre cas) figure II.1). La bielle relie le piston au vilebrequin pour permettre le mouvement rotatif. Le vilebrequin est un arbre commun aux pistons qui permet de transmettre un mouvement rotatif, lissé par un volant d'inertie, à la boîte de vitesse et aux roues motrices du véhicule. Le fonctionnement d'un moteur à combustion interne se décompose en étapes élémentaires plus connues sous le nom de temps moteur. Un temps moteur correspond à un trajet du PMH vers le PMB, ou inversement (soit un demi-tour de vilebrequin). La succession de ces temps est équivalente au cycle moteur, c'est-à-dire à la période de fonctionnement du moteur. On distingue deux types de moteurs, les moteurs deux temps (le cycle complet s'étend sur un tour de vilebrequin) et les moteurs dont la période correspond à quatre temps (deux tours de vilebrequin).

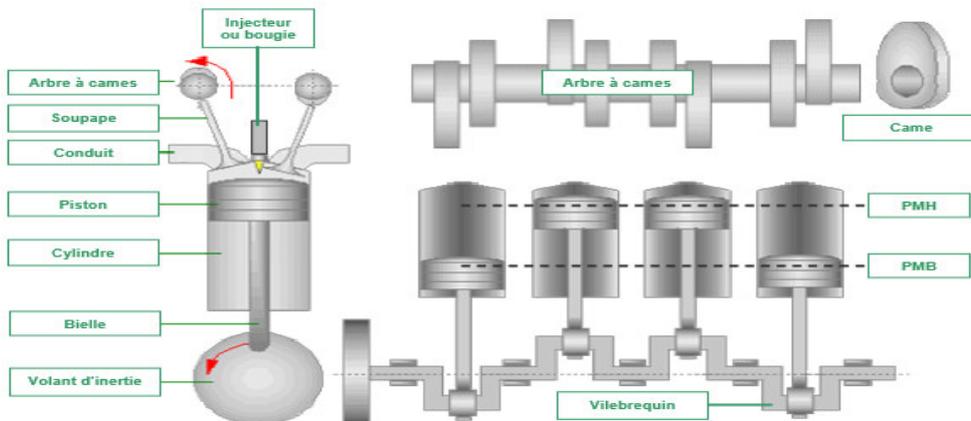


Figure. II.1. Les principes composant d'un moteur à piston à 4 cylindres.

II.2.1. Cycle à deux temps :

Le moteur à 2 temps réalise le cycle Beau de Rochas (aspiration, compression, détente, échappement) en 2 courses de piston au lieu de 4 prévues dans le moteur 4 temps :

A. Admission dans le carter et compression dans le cylindre.

B. Compression dans le carter et explosion-détente dans le cylindre.

C. Transfert carter/cylindre et échappement du cylindre.

- **1er temps (du PMB au PMH) :** Le piston étant au PMB, l'air est introduit sous une faible pression de 1.2 à 1.4 bars. Au 1/7 environ de sa course, le piston ferme les lumières pour permettre la compression.
- **2ème temps (du PMH au PMB) :** La combustion commence un peu avant le PMH ; après le PMH, la descente du piston réalise le "temps moteur". Au 6/7 environ de sa course, le piston découvre l'orifice d'échappement pour permettre l'évacuation des gaz brûlés. PMB.

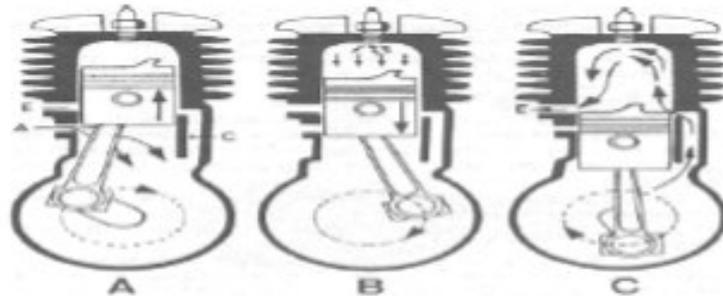


Figure. II.2. Moteur à combustion interne à 2 temps

II.2.2. Cycle à quatre temps :

○ 1er temps : Admission :

Initialement, le piston se trouve au PMH, la soupape d'admission est ouverte et la soupape d'échappement est fermée. Durant sa première course du PMH vers le PMB, le piston crée une dépression. L'air frais est alors aspiré à la pression atmosphérique¹ à travers la soupape. La phase d'aspiration ou d'admission s'achève par la fermeture de la soupape lorsque le piston atteint le PMB. Chaque temps du cycle a son importance : ici, la qualité de l'admission conditionne la puissance du moteur car la quantité de combustible qui peut être brûlée est

intimement liée à la charge d'air dans les cylindres. L'énergie nécessaire pour effectuer ce temps est fournie au piston par le vilebrequin par l'intermédiaire de la bielle.

○ **2e temps : Compression :**

Tout au long de cette étape, les deux soupapes sont fermées, le cylindre est donc hermétiquement clos. Le volume de la chambre de combustion diminue à mesure que le piston se déplace du PMB vers le PMH. L'air admis précédemment est alors comprimé, sa pression et sa température augmentent considérablement. L'élévation de la pression dans le cylindre dépend du rapport volumétrique : en général, à l'issue de cette phase, la pression de l'air atteint de 2 à 3 fois sa valeur initiale.

○ **3e temps : Détente :**

Durant ce temps les soupapes de l'admission et de l'échappement se maintiennent fermées. La combustion du mélange (air-carburant) provoque une augmentation considérable de température et de pression des gaz qui se trouvent enfermés dans le volume de la chambre de combustion. La température arrive jusque à 2200K et plus, la pression peut atteindre 15 Mpa et plus, la détente des gaz crée un effort mécanique sur la surface de piston et oblige celui-ci à se déplacer du PMH vers PMB. Ainsi on obtient un travail mécanique. Le mouvement rectiligne du piston est transformé en mouvement de rotation du vilebrequin grâce à la liaison bielle-manivelle.

○ **4e temps : Echappement :**

Avec l'arrivée de piston au PMB, le temps de la détente se termine. A l'aide du système de distribution, la soupape d'échappement s'ouvre laissant s'échapper les gaz brûlés sous l'effet de leur pression et du déplacement du piston. Lorsque le piston se retrouve au PMH, la boucle est bouclée, et un nouveau cycle peut alors commencer. Cette étape joue un rôle primordial ; En effet, si l'expulsion des gaz brûlés est incomplète, la quantité d'air frais admissible au cycle suivant sera moindre et le mélange n'aura pas la même composition. La variation de la richesse du mélange d'un cycle à l'autre est l'une des causes de la dispersion cyclique et, par conséquent, de bruits et de vibrations indésirables.

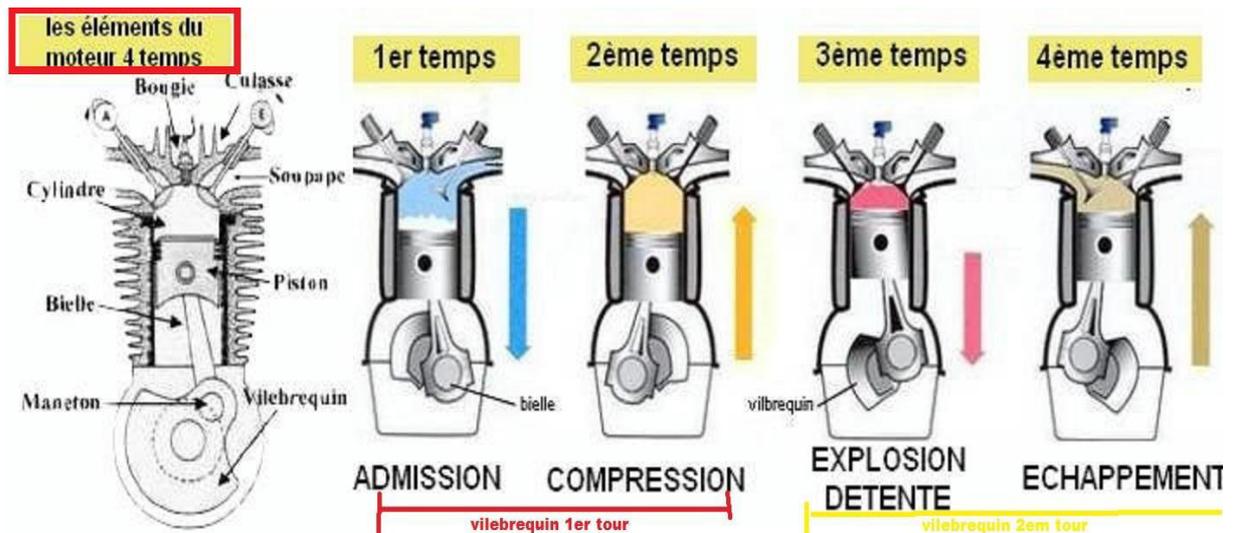


Figure. II. 3. Le cycle de 4 temps pour le moteur à combustion interne.

II.3. Différents types des moteurs à combustion interne :

Ils existent plusieurs types des moteurs à combustion interne qui fonctionnent avec différents carburants :

II.3.1. Moteur à allumage par compression (à diesel) :

Le moteur Diesel est une machine thermique au sein de laquelle l'énergie thermique est convertie en énergie en travail mécanique. La chaleur est produite par la combustion qui libère l'énergie du mélange air- carburant et le travail résulte de la détente des gaz. Le moteur diesel est à combustion interne dont l'allumage n'est pas commandé mais est spontané lors de l'injection du carburant, par phénomène d'autoallumage (auto-inflammation). Le rendement est supérieur à celui d'un moteur à essence: une proportion plus grande de la chaleur est convertie en travail. Le carburant Diesel coûte environ 10 % moins cher que l'essence.

Les moteurs diesel sont classés selon le type d'injection et de chambre de combustion qui les équipe. Deux grandes familles de types de combustion existent L'injection directe L'injection indirecte [12].

II.3.2. Moteur à allumage commandé :

Le moteur à allumage commandé (AC) est l'un membre éminents de la grande famille des moteurs alternatifs à combustion interne, c'est-à-dire des moteurs qui produisent du travail par action directe sur un piston de la pression provenant de l'inflammation d'un mélange combustible, avec transformation du mouvement alternatif en rotation par

l'intermédiaire d'un système bielle-manivelle. Le terme allumage commandé vient de ce que l'inflammation est au moyen d'une étincelle, généralement d'origine électrique, en moment bien déterminé du cycle. L'alimentation avec des mélanges homogènes d'air et de vapeur carburant est indispensable pour assurer un bon allumage, ce qui impose des carburant de bonne volatilité, telles les essences de pétrole, d'où son appellation, plus familière ; de <<moteur à essence>>. Son omniprésence dans le domaine de la traction routière, et particulièrement dans celui de l'automobile, est à l'origine de sa grande popularité [13].

La consommation de carburant est plus élevée dans les moteurs à allumage commandé, non seulement à cause de la question du rendement déjà évoquée, mais aussi à cause de la valeur énergétique plus faible de l'essence.

Le mélange air / essence peut s'effectuer par [14]:

- Carburateur
- Injection indirecte d'essence
- Injection directe d'essence

II.3.3. Moteur à gaz naturel :

Aujourd'hui, l'utilisation du gaz naturel se développe beaucoup, depuis l'application domestique ; le gaz naturel est utilisé comme matière première en chimie, comme carburant dans les moteurs. Le gaz naturel est le combustible fossile le plus propre qui a fait l'objet d'études approfondies dans les moteurs à allumage par étincelle et à allumage par compression. Le gaz naturel (GN) est suggéré comme un combustible attractif car ce dernier émet moins de polluant que ce soit, Le gaz naturel est bien moins nocif pour le climat et la santé que l'essence ou le diesel. Il est aussi meilleur marché.

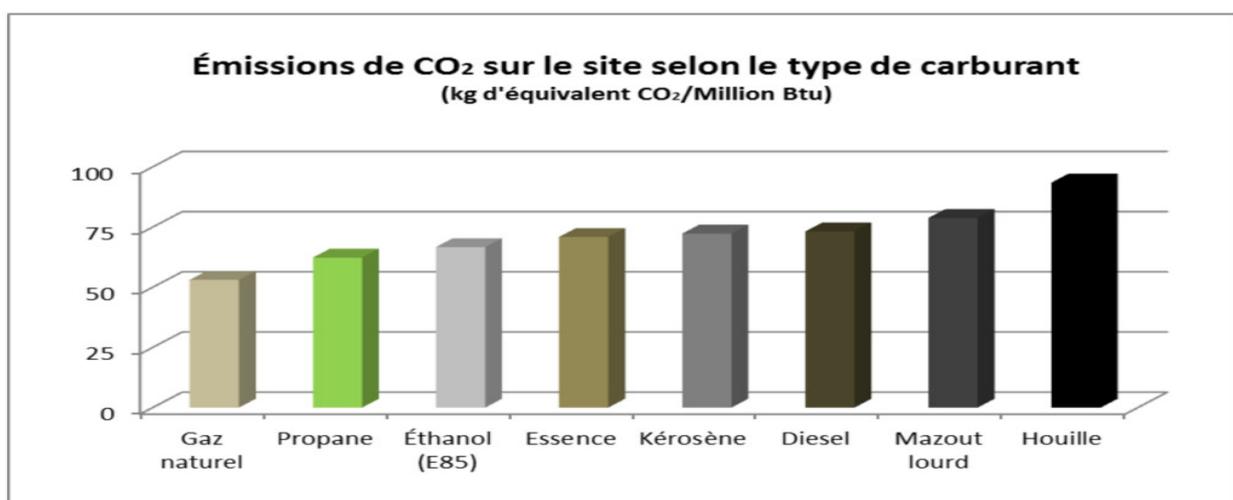


Figure. II.7. Les émissions de CO₂ sur le site selon le type carburant

III.3.3.1. Composition chimique du gaz naturel :

Le gaz naturel est généralement constitué d'un mélange hydrocarbure. Il constitue majoritairement du méthane (CH₄) à plus de 90%, de l'éthane, propane et butane ainsi que en plus faible quantité de l'azote (moins de 2%) et du dioxyde de carbone (CO₂ moins de 1%).

❖ Le méthane : l'hydrocarbure le plus simple

Le méthane est un gaz de la famille des hydrocarbures. Un hydrocarbure est un composé organique qui ne contient que des atomes de carbone et d'hydrogène. Avec un seul atome de carbone et quatre atomes d'hydrogène, le méthane (CH₄) est l'hydrocarbure le plus simple. Voici d'autres hydrocarbures : le propane (C₃H₈), l'éthane (C₂H₆) et le butane (C₄H₁₀).

❖ Propriétés du méthane :

- Le méthane est inodore, incolore et fade ;
- La densité du méthane est d'environ la moitié de celle de l'air (et c'est pourquoi le méthane a tendance à monter) ;
- Le méthane a une très faible solubilité dans l'eau (ce qui permet de le nettoyer à l'aide d'un épurateur d'eau simple) ;
- La combustion du méthane produit une flamme bleue et une grande quantité de chaleur.

III.3.3.2. Avantage d'utilisation du gaz naturel :

Les Avantages du gaz naturel par rapport aux carburants traditionnels :

- Les émissions polluantes des combustibles conventionnels à savoir le gazole et l'essence ont des effets néfastes sur l'environnement et les êtres vivants. Le gaz naturel (GN) est suggéré comme un combustible attractif car ce dernier émet moins de polluant que ce soit, les oxydes d'azote NOX, les particules de suie, le monoxyde de carbone CO et le dioxyde de carbone CO₂ [15].
- Les véhicules roulant au gaz naturel sont actuellement plus chers que ceux fonctionnant avec les carburants traditionnels. Néanmoins, le gaz naturel véhicule est significativement moins cher que les carburants classiques tels que l'essence ou le diesel : 1 kg de gaz naturel comprimé coûte à la pompe de 30 à 40 % moins cher qu'un litre de diesel. L'écart de prix entre un véhicule au gaz et un véhicule essence ou diesel va diminuer au fil du temps.

- les moteurs au GN produisent moins des particules de suie que les moteurs diesel, car le GN ne contient pas des composés aromatique tel que le benzène et aussi moins d'impureté que le gazole et l'essence. Une basse température de combustion contribue au faible niveau d'émission de NOx lors de fonctionnement avec un taux de compression élevé ou avec la suralimentation [15].
- Enfin, puisque l'état gazeux de GN évite la formation de mouillage dans le conduit d'admission et sur la chemise du cylindre, ainsi faible pourcentage de HC qui dû au phénomène d'adsorption et désorption du film d'huile, les émissions de HC sont faibles par rapport au moteur à essence [15].

II.3.3.3. Techniques de combustion du GN dans les moteurs :

Cette section présente une revue de travaux réalisés en vue d'optimiser l'utilisation du GN dans les moteurs. Les travaux de recherche s'intéressant à la réduction des émissions produites par le gaz naturel en tant que la résolution des problème lies a son usage ont débuté en 1991 on estime que si ces moteurs sont optimisés en termes de paramètre de conception et de conditions de fonctionnement ils seraient plus compétitifs ; le rendement et les émissions du moteur varient en fonction des techniques de combustion et d'injection utilisées[16].

II.3.3.3.1. Moteurs stœchiométriques au gaz naturel :

La combustion stœchiométrique est une combustion complète avec un mélange correspondant à la consommation totale du combustible et du comburant. Une combustion complète est telle que, tout le carbone (C) produit du CO₂, et tout l'hydrogène (H) produit du H₂O. Lorsque le moteur fonctionne avec des mélanges proches de la stœchiométrie, la température dans le cylindre augmente, et par conséquent, les contraintes thermiques et la tendance au cliquetis augmentent aussi. Cela conduirait à des restrictions sur l'utilisation de la suralimentation, de taux de compression élevés, et d'avance à l'allumage pour un couple au frein maximum. Par conséquent, le moteur fonctionnerait avec un moindre rendement qu'un moteur semblable en mélange pauvre [16].

II.3.3.3.2. Moteur au gaz naturel en mélange pauvre :

Une des technologies de combustion dans les moteurs au gaz naturel. Initiée au début des années 80 est la technique de combustion en mélange pauvre. Cette technique utilise un mélange air/gaz qui a plus d'air que la stœchiométrie. Vu sous un autre angle elle nécessite moins de carburant dans le cylindre. Ceci peut avoir comme conséquence une moindre consommation de carburant comparée à la combustion stœchiométrique. La puissance étant

habituellement maintenue par une suralimentation bien que l'économie de carburant d'un moteur en mélange pauvre au gaz naturel ne soit pas aussi élevée que celle du moteur diesel. Elle est plus élevée que celle d'un moteur stœchiométrique en raison de l'augmentation du rapport de la chaleur spécifique [16].

II.3.4. Moteur à mélange gaz naturel / gazole :

Le gazole est un hydrocarbure issu du raffinage du pétrole, il se compose majoritairement d'atomes de carbone et d'hydrogène et contient d'autres éléments en de très faibles quantités : soufre, azote et métaux lourds. Le remplacement des carburants automobiles à forte teneur en carbone comme le gazole par des carburants automobiles à faible teneur en carbone comme le gaz naturel peut s'avérer plus difficile. Par exemple dans le cas des moteurs diesel. Le gaz naturel comme carburant automobile n'explose pas par le seul fait de compression, même en le comprimant à plusieurs centaines de bars. La seule solution envisageable consiste à les mélanger. On fait démarrer le moteur au gazole, et une fois atteint sa température normale de fonctionnement, le système d'alimentation en gaz naturel entre en action, pour fournir jusqu'à 60-70 % des besoins en carburant. Les émissions de CO₂ et des NOx seront considérablement réduites et les rejets de particules diminuent également.

II.3.5. Moteur à hydrogène :

L'hydrogène, ou plus exactement le dihydrogène(H₂) est un vecteur énergétique et non pas une source d'énergie car il n'existe pratiquement pas à l'état naturel. En effet, dans la nature, on le retrouve essentiellement combiné à l'oxygène (dans l'eau) ou à de longues chaînes carbonées (dans les hydrocarbures). Un système de production d'hydrogène par voie renouvelable, utilisant un électrolyseur alimenté par des générateurs photovoltaïques et éoliens. Il faut donc d'abord dépenser de l'énergie pour produire du dihydrogène à partir d'eau ou d'hydrocarbures avant de récupérer l'énergie via sa combustion dans pile combustible ou dans les moteurs.



Figure. II. 8. Moteur à hydrogène sur BMW 2015.

II.3.5.1. Combustion de l'hydrogène [17] :

Le moteur à hydrogène permet de générer une puissance mécanique à partir d'hydrogène en fonctionnant comme un moteur à combustion interne raccordé à un réservoir ou comme un moteur électrique branché sur une pile à combustible. Les applications peuvent être stationnaires ou embarquées (véhicules). Dans la mesure où l'hydrogène est produit à partir d'une source d'énergie non polluante, ce moteur ne génère pas directement de polluants dans le processus de combustion. En théorie et si le dihydrogène est pur, le produit de combustion est constitué exclusivement d'eau.

Le classique moteur à piston est peu adapté à la combustion de l'hydrogène pur. La faible densité du mélange hydrogène-air nécessite des conduits d'admission et des soupapes de grand diamètre et la course sinusoïdale du piston crée un pic de pression trop long au point mort haut pour permettre un fonctionnement en détonation. Puisque la vitesse de combustion de l'hydrogène dans l'air est six fois plus élevée que celle de l'essence, le moteur nécessite ainsi un réglage précis, qui est également indispensable pour minimiser les émissions des NOx (le rapport hydrogène-air ne dépassant pas la stœchiométrie de 50 %).

II.3.5.2. L'hydrogène dans les moteurs à combustion interne

L'utilisation de l'hydrogène comme carburant dans les moteurs à combustion interne offre plusieurs avantages :

- L'efficacité thermique du moteur augmente avec l'augmentation du pourcentage d'hydrogène et elle est maximale avec 100% d'hydrogène ; le HC diminue drastiquement avec le pourcentage croissant de substitution de l'hydrogène et devient zéro à 100% d'hydrogène, la valeur CO diminue continuellement avec l'augmentation du pourcentage de substitution de l'hydrogène ; le taux de dégagement de chaleur augmente avec la substitution de l'hydrogène à des rendements élevés [18].
- À bas régime, le moteur à hydrogène est plus efficace et à haut régime, c'est le moteur thermique qui prend le dessus. Différentes voies d'amélioration de ce type de moteur permettront d'atteindre un rendement de plus de 40 %, même à charge partielle, qui est supérieur à celui des voitures roulant avec des carburants conventionnels (entre 20 et 30 %).
- Son utilisation ne connaît pas les mêmes problèmes que ceux des carburants liquides, tels que le bouchon de vapeur (vaporlock), la vaporisation insuffisante, le mélange pauvre,...etc.
- Il a un très large domaine d'inflammabilité (de 4 à 75% en volume) et peut donc être brûlé avec une large gamme de mélanges air-carburant. De ce fait, le fonctionnement en mélange pauvre est possible, ce qui offre une économie de carburant, une réaction de combustion plus complète [19] ainsi qu'une température de combustion finale plus faible. La quantité de polluants émis dans les gaz d'échappement tels que les oxydes d'azote est ainsi réduite.
- Il a une énergie d'allumage (énergie minimale d'inflammation) très faible, ce qui permet d'enflammer les mélanges pauvres et assurer un allumage rapide. Cependant, l'utilisation de l'hydrogène comme carburant a des inconvénients :
- L'hydrogène peut s'enflammer ou exploser au contact de l'air. Il doit donc être utilisé avec précaution, de ce fait, il faut éviter tout risque de fuite, et toute situation confinée peut s'avérer dangereuse.
- La faible énergie d'allumage signifie que les gaz chauds et les points chauds dans le cylindre peuvent servir de sources d'allumages prématurés au cours de la course d'admission. Ceci se traduit par les phénomènes de pré-allumage et d'auto-allumage qui conduisent à l'apparition de cliquetis (vibrations des parois de la chambre de combustion) et de retour de flamme (ou back flash)[20].
- Puisque sa température d'auto-inflammation est trop élevée, l'hydrogène ne peut être utilisé directement dans un moteur diesel. Afin d'allumer l'hydrogène dans ce type de

moteur, des bougies d'allumage doivent être installées ou bien, on doit utiliser une faible quantité de carburant diesel pour l'allumer (allumage pilote).

- De plus l'hydrogène a une courte distance de propagation de la flamme, plus petite que celle de l'essence. Par conséquent, les flammes d'hydrogène se propagent près de la paroi du cylindre et de l'injecteur. La tendance de retour de flamme peut alors augmenter et par conséquent, une flamme du mélange hydrogène-air passe plus facilement à travers une vanne d'admission presque fermée que les flammes des hydrocarbures – air [20].
- Ces anomalies de combustion, dont le retour de flamme fait partie, ont été l'obstacle le plus important dans le développement des moteurs à hydrogène.

II.3.6. Moteur à mélange hydrogène/hydrocarbure :

L'hydrogène peut être utilisé avantageusement dans les moteurs à combustion interne comme additif à un carburant hydrocarboné. En effet, la faible limite d'énergie d'allumage et la grande vitesse de combustion de l'hydrogène contribuent à améliorer la combustion du mélange hydrogène/hydrocarbures, réduisent l'effet de l'anomalie de combustion tout en améliorant les performances et l'économie du carburant et réduisent aussi les émissions polluantes. En effet, l'amélioration de la combustion du mélange hydrogène/hydrocarbures est due essentiellement à la faible limite d'énergie d'allumage et à la grande vitesse de combustion de l'hydrogène. En plus, les combustibles liquides sont stockés sous des pressions assez faibles laissant peu de place à l'ajout d'hydrogène. En outre, le point d'ébullition de l'hydrogène liquide est de -253 °C (20.35 K), ce qui provoquerait le gel des autres carburants, donc toute possibilité de stockage dans un même réservoir est exclue. L'hydrogène peut être utilisé en conjonction avec les combustibles liquides denses comme l'essence, l'alcool ou le diesel à condition que chacun soit stocké séparément et mélangé à l'état gazeux immédiatement avant l'allumage.

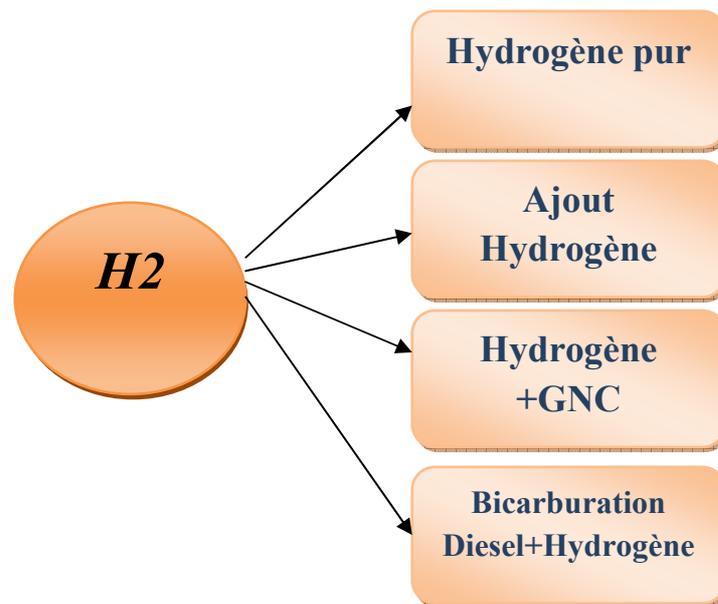


Figure. II.9. Utilisation de l'hydrogène dans les moteurs à combustion interne

En 1974, des chercheurs du Laboratoire Jet Propulsion de l'Institut Californien de Technologie publient un document intitulé : « Générateur embarqué d'hydrogène pour une injection partielle d'hydrogène dans les moteurs à combustion interne ». En 1977, la NASA a effectué des recherches expérimentales sur un moteur fonctionnant avec un mélange hydrogène/essence. Les chercheurs ont démontré que la vitesse de flamme élevée de l'hydrogène est en mesure d'étendre la plage de fonctionnement en mélange pauvre du moteur à essence. Ils ont réussi aussi à réaliser avec succès un reformage de vapeur de méthanol pour la production in situ d'hydrogène [21].

D'après Aritra Chatterjee et al [22] On observe que l'efficacité thermique est améliorée avec l'addition d'hydrogène à l'essence comme combustible. Pour le carburant mixte, les émissions de HC et de CO₂ diminuent. L'émission de CO est notée comme étant plus particulièrement proche des conditions de rapport air-carburant stœchiométrique.

II.3.7. Moteur à mélange hydrogène /gaz naturel :

Les mélanges gaz naturel / hydrogène peuvent être une solution de transition vers une « énergie hydrogène ». La combustion de ces mélanges permettrait une réduction globale des émissions en attendant le développement de nouvelles technologies.

Tableau. II. 1. Les émissions des polluants toxiques en fonction de l'ajout d'hydrogène dans le gaz naturel.

gram/Km	CO	HC	CH ₄	NO _x
GNV (GNC)	0.010	0.000	0.250	2.080
HGNC (20%)	0.008	0.000	0.205	1.248
HGNC (30%)	0.008	0.000	0.180	1.000
H ₂ (MCI)	0	0	0	> 0

Le carburant mélange gaz naturel/hydrogène permet de réduire la consommation énergétique et apporte un agrément de conduite reconnu par les conducteurs de bus. Les études montrent que ce carburant permet d'obtenir des bénéfices immédiats pour l'environnement. En effet, l'hydrogène améliore la combustion de gaz naturel, ce qui permet d'atteindre de meilleures performances techniques et de réduire les émissions de gaz à effet de serre.

L'hydrogène permet d'augmenter les performances environnementales du GNV :

- réduisant de 8 % les polluants locaux et gaz à effet de serre par rapport au GNV
- réduisant de 10 % des NO_x par rapport au GNV.

D'après des études par plusieurs par des chercheurs tels que Hoekstraet al [23] a réalisé une étude expérimentale sur l'utilisation de l'hythane comme carburant. Le résultat des essais a démontré que des niveaux extrêmement bas de NO_x sont possibles avec des augmentations modérées en hydrocarbures non brûlés en utilisant des taux d'hydrogène entre de 28 et 36%. Zuohua Huang et al. [24] Cette étude a montré que : L'injection tardive réduit le taux d'excès d'air et rend le mélange plus pauvre.

Les émissions des NO_x et du CO₂ augmentent quand on avance les moments d'injection du carburant. Et par T. Oukssel et al [25] leur objectif principal de recherche était d'étudier les moteurs thermiques. Ce mode de combustion connu sous le nom 'HCCI', (Homogeneous Charge Compression Ignition). Cette étude a montré que l'ajout d'hydrogène au GNC est une alternative assez intéressante. Elle conduit à une diminution des délais d'inflammation, c'est-à-dire une augmentation de la réactivité et une diminution des émissions polluantes le NO et le CO₂.

Z. Huang et al [26] ont étudié la combustion des hydrocarbures enrichis en hydrogène et son application dans les moteurs. Sur la base de la combustion fondamentale, un moteur à

allumage par bougie et un moteur à injection directe alimentés par des mélanges gaz-hydrogène ont été réalisés et la voie technique du gaz naturel-hydrogène associée à la recirculation des gaz d'échappement a été expérimentalement démontrée amélioration de l'efficacité thermique et réduction des émissions.

II.3.7.1. Les caractéristiques de gaz naturel et de l'hydrogène:

Les caractéristiques physico-chimiques de gaz naturel et de l'hydrogène.

Tableau. II. 2. Les caractéristiques physico-chimiques de gaz naturel et de l'hydrogène

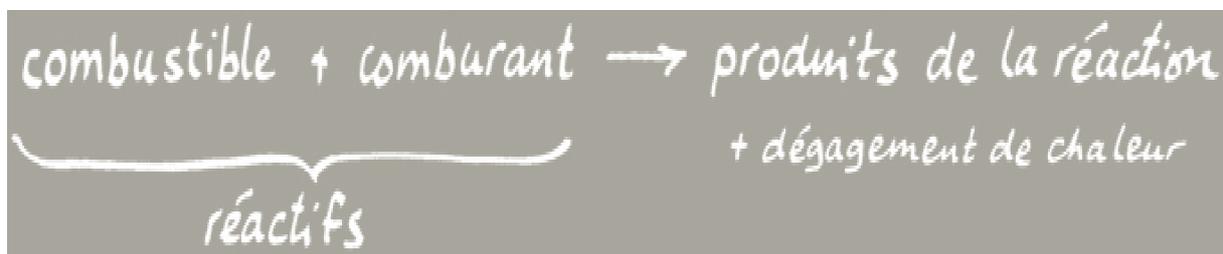
Propriétés	Méthane CH ₄	Hydrogène H ₂
Masse molaire (g/mol)	16.032	1.008
Masse volumique (conditions atmosphériques) (kg/m ³)	0.7	0.08
Chaleur de combustion 'inférieure', (kJ/g)	50	120
Energie explosive, (kg TNT/m ³)	7.03	2.02
Coefficient de diffusion dans l'air, (cm ² /s)	0.16	0.61
Vitesse de détonation dans l'air, (km/s)	1.8	2
Vitesse de flamme dans l'air, (cm/s)	37	260
Limite de détonabilité, (%vol)	6.3-13.5	13-65
Température de flamme, (°C)	1875	2045
Energie minimale d'inflammabilité (MJ, pour mélange stœchiométrique à pression en température ambiante)	0.29	0.02
Température d'auto-inflammation, (°C)	540	585
Limite du domaine d'inflammabilité dans l'air, (%vol)	5.3-15	4-75
Chaleur de combustion 'inférieure', (kJ/g)	50	120
Température de solidification (°C)	-182,5(1atm)	14.01K
Energie minimale d'inflammation (J)	290	20
Pouvoir calorifique Inférieur (PCI)	50020KJ/Kg	119930 KJ/Kg
Pouvoir calorifique Supérieur (PCS) (KWh)	1	142MJ/Kg
Indice d'octane	130	120

Chapitre III

Notions sur les flammes et régime de combustion

III.1. Introduction :

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. 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 la chaleur (chaudières ou fours domestiques et industriels), de l'électricité (centrales thermiques), que pour le transport (moteurs automobiles et aéronautiques, moteurs fusées,...). La combustion peut être caractérisée comme une (ou des) réaction(s) irréversible(s) fortement exothermique(s) entre un combustible et un comburant (ou oxydant) selon le schéma global :



- **Le comburant** : est l'autre réactif de la réaction chimique. Il s'agit de l'oxygène pur ou de l'air ambiant la plupart du temps, Composition en volume ou en moles de l'air : Oxygènes : 20.95% ; Azote : 79.05%
- **Un carburant** : est un combustible qui alimente un moteur (moteur thermique etc.) qui transforme l'énergie chimique du carburant en énergie mécanique ou en poussée. Le combustible peut-être :
 - solide formant des braises (bois, carton, papier, PVC, tissus...)
 - liquide ou solide liquéfiable (essence, gazole, kérosène, polyéthylène, polystyrène, huile)
 - gazeux comme le gaz naturel, gaz de ville, le gaz de raffinerie.
 - Un métal (fer, aluminium, sodium, magnésium...).

Dans notre cas le combustible est gaz naturel (méthane) enrichi hydrogène

- **Une énergie d'activation** : généralement la chaleur ou une flamme, par exemple celle produite par une étincelle.

Deux phénomènes essentiels se déroulent pendant la combustion : l'auto-inflammation et la propagation qui est la conséquence de l'auto-inflammation. L'auto-inflammation se produit lorsque la température, la pression et la composition des réactifs atteignent un seuil critique. Elle est la première manifestation de la combustion. Quant à la propagation dans le reste du mélange, elle apparaît après que l'auto-inflammation a été déclenchée. Pour que la propagation puisse s'installer, il faut que les trois paramètres de pression, température et composition du mélange soient en même temps supérieurs à un seuil critique. Certains phénomènes de parois et de coincement peuvent empêcher la propagation.

III.2. Définition d'une flamme :

Une flamme est un milieu réactionnel dans lequel se déroule une réaction de combustion. Elle est généralement associée à une zone réactive, lumineuse appelée front de flamme, onde de combustion ou encore zone de combustion. Les propriétés de propagation spatiale de la flamme résultent de l'action conjuguée de processus chimiques (production rapide de chaleur et d'espèces chimiques réactives), physiques (transport, diffusion), ainsi que de déplacement de matière (diffusion moléculaire) et de chaleur (convection). Donc, La flamme (zone de réaction) est le résultat du transport des espèces, du transport de la chaleur et de la réaction chimique.

Le front de flamme est une fine zone dans laquelle se déroule la combustion ; elle sépare deux milieux : un milieu contenant le combustible et un milieu contenant les produits issus de la combustion.

Deux situations généralement rencontrées sont identifiées selon la procédure utilisée pour introduire les réactifs dans la zone de flamme :

➤ **Les flammes pré-mélangées :**

Le carburant et l'oxydant sont pré-mélangés avant d'atteindre le front de flamme .Ce mode est souvent utilisé en mélange pauvre permettant ainsi d'augmenter le rendement et réduire la production des NOx. Ce type de flamme augmente le risque d'explosion qui provient du mode stockage du mélange réactif.

➤ **Les flammes dediffusion ou non pré-mélange :**

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 moléculaire.

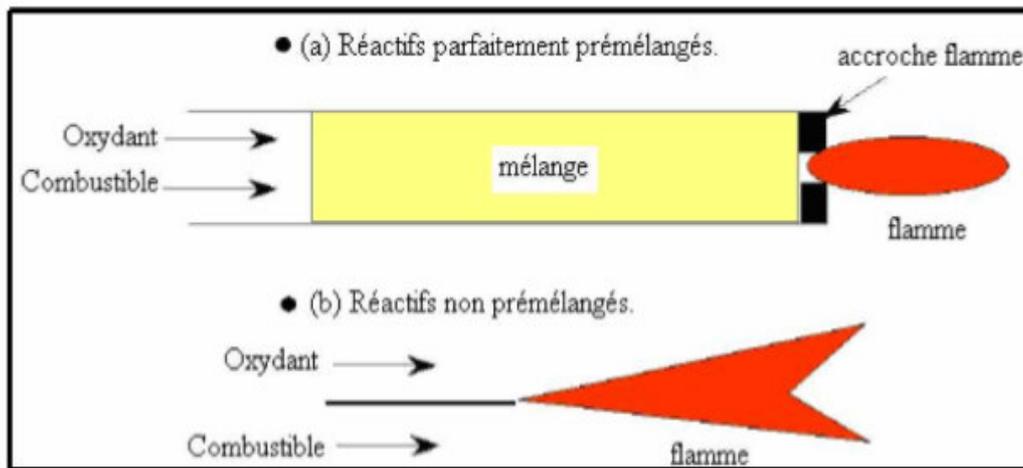


Figure. III. 1. Types de flamme : (a) pré-mélangée, (b) non pré-mélangée.

Le régime d'écoulement des gaz dans le milieu réactionnel permet également de classer les flammes en deux catégories, les flammes laminaires et les flammes turbulentes. La transition entre les deux types d'écoulement est observée pour une certaine valeur du nombre de Reynolds

$$Re = \frac{\rho \cdot V \cdot X}{\mu}$$

Avec :

- ρ : la masse volumique du mélange gazeux ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$) ;
- V : la vitesse de l'écoulement des gaz ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$) ;
- X : la dimension critique du système (dans le cas d'un écoulement dans une conduite cylindrique ; x est le diamètre du tube (m)) ;
- μ : la viscosité dynamique ($\text{g} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$).

L'écoulement est dit laminaire lorsque le nombre de Reynolds est inférieur à 2300. Dans ce type de flamme, la zone réactionnelle dépend du couplage entre les phénomènes de convection, de cinétique chimique et les processus de transfert moléculaire.

L'écoulement est dit turbulent si le nombre de Reynolds est supérieur à 2300. L'augmentation de la vitesse d'écoulement, et donc du nombre de Reynolds, génère des forces de friction sur les parois qui provoquent la formation de « turbulences ». Par conséquent dans une flamme de ce type le milieu réactionnel ne peut plus être considéré comme homogène.

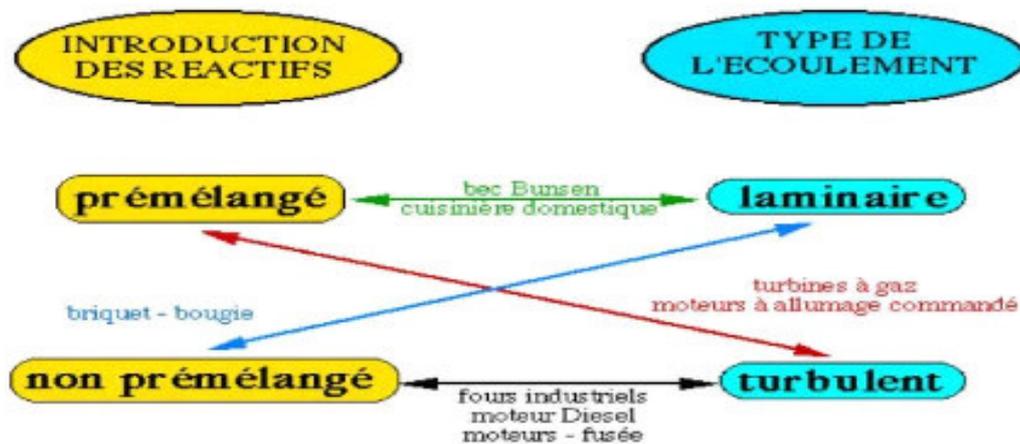


Figure. III. 2. différents systèmes pratiques de combustions classés selon le type d'introduction des réactifs (pré-mélangée ou non) et la nature laminaire ou turbulente de l'écoulement.

III.3. Combustion laminaire :

On considère les flammes en milieu laminaire, c'est à dire en milieu où les échanges par diffusion turbulente sont pratiquement inexistantes. Si les flammes laminaires semblent n'intervenir que dans quelques applications plutôt anecdotiques (bougies et flamme de briquet) la compréhension de la structure de ces flammes est cependant fondamentale pour la description et la modélisation de nombreuses situations industrielles.

III.3.1. Flamme laminaire pré-mélangée :

La structure d'une flamme laminaire de pré-mélange est présentée sur la figure (II.3). Gaz frais (mélange combustible/comburant) et gaz brûlés (produits de combustion) sont séparés par une mince zone de réaction (le front de flamme). Le front de flamme chauffe les gaz frais principalement par diffusion et conduction thermiques (zone de préchauffage). Lorsque la température des gaz frais atteint la température critique d'auto inflammation, les gaz frais s'enflamment. Le front de flamme se propage des gaz brûlés vers les gaz frais. C'est une réaction de proche en proche. La vitesse de propagation S_L dépend de nombreux paramètres (mélange, pression et température des gaz frais, ...) [27].

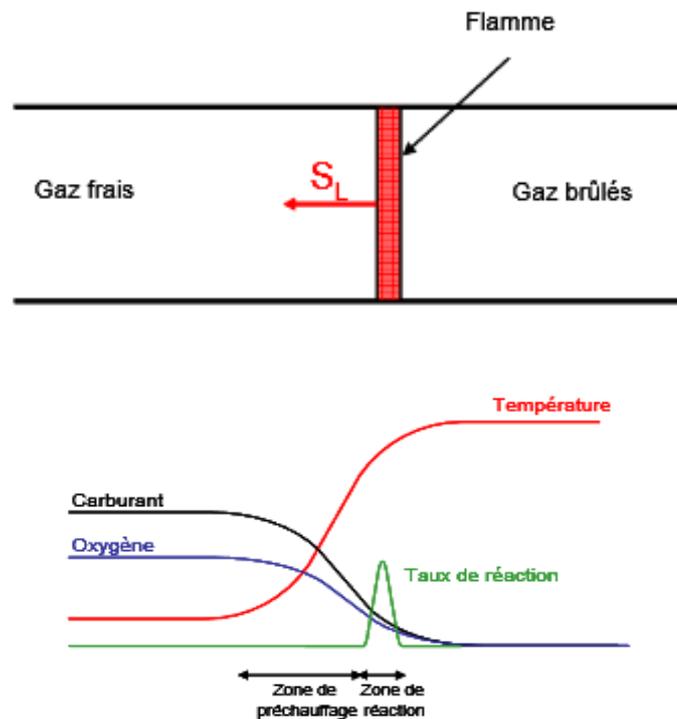


Figure. III. 3. Structure d'une flamme laminaire pré mélangée) [27].

Dans la théorie de Mallard et Le Châtelier (1883), la zone intermédiaire entre les gaz frais et les gaz brûlés peut être découpée en deux parties (Figure 1) :

- la zone de préchauffage
- la zone de réaction

La flamme laminaire est donc caractérisée par plusieurs paramètres :

- La vitesse de propagation laminaire qui représente la rapidité du front de flamme à consommer le mélange de gaz frais. Il est important de noter que cette vitesse peut être largement modifiée par l'étirement du front de flamme. Il est alors nécessaire de définir une vitesse de flamme laminaire non-étirée S_L^0 .
- L'épaisseur de flamme est un autre paramètre prépondérant qui permet de caractériser la structure du front de flamme.

, l'épaisseur de Zeldovich est définie par l'équation suivante :

$$\delta_L = \frac{\lambda}{c_p \rho_f S_L}$$

Avec :

- λ : Conductivité thermique du mélange réactif

- c_p : Chaleur spécifique à pression constante
- S_L : vitesse de propagation laminaire
- ρ_f : Masse volumique du mélange frais

III.3.2. Flamme laminaire non pré mélangée :

Dans les flammes de diffusion (ou non-pré-mélangées par opposition aux flammes parfaitement pré-mélangées), les réactifs sont introduits séparément dans la zone de réaction, de part et d'autre de la flamme. Une représentation schématique d'une flamme d'est donnée sur la figure 2.1. Dans ce régime de combustion, la flamme est pilotée par la quantité de réactifs entraînés par diffusion moléculaire dans la zone de réaction. L'apport de masse par diffusion limite alors les vitesses de réaction.

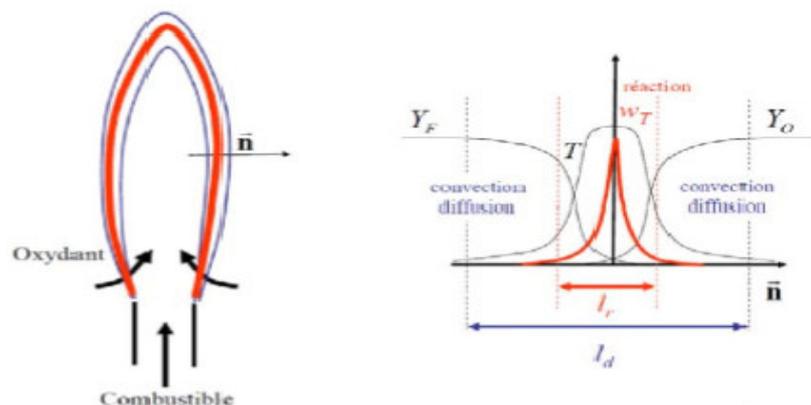


Figure. III. 4. Structure d'une flamme laminaire de diffusion [28].

III.4. Combustion turbulente :

Dans les flammes Dans un foyer, l'écoulement est turbulent, c'est-à-dire que la vitesse des gaz, mesurée en un point, fluctue continuellement de façon apparemment aléatoire, même en régime parfaitement établi ; cela est vrai aussi 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'obstacles tels que les injecteurs.

III.4.1. Combustion pré-mélangée turbulente

L'utilisation industrielle des phénomènes de combustion s'inscrit dans une volonté de production d'énergie, l'intérêt étant de produire un maximum d'énergie par unité de volume. Dans les années 1880, Mallard et Le Chatelier ont montré que la turbulence affecte la vitesse de combustion. Damköhler (1947), il a fait des recherches sur la combustion turbulente des flammes prémélangées, il adopta l'idée qu'une turbulence à grande échelle ne fait que plisser

la flamme laminaire sans modification significative de sa structure interne; alors qu'une turbulence à petite échelle affecte les processus de transfert dans la structure interne de la flamme laminaire et Kuo et al [29] ont considéré dans leur approche que l'échelle temporelle associée à la flamme turbulente est différente de celle de la flamme laminaire.

L'énergie cinétique de la turbulence k et l'échelle intégrale spatiale de la turbulence l_t , qui caractérisent la turbulence dans les gaz frais, nous donnent un nombre de Reynolds turbulent

$$Re_t = \left(K^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{l_t}{\nu} \right) \text{Où } \nu \text{ est la viscosité cinématique.}$$

L'échelle intégrale temporelle (τ_t) correspondant au temps caractéristique des gros tourbillons est estimée par :

$$\tau_t = \frac{l_t}{k^{1/2}}$$

L'échelle spatiale de Kolmogorov, représentative de la dimension caractéristique des plus petites structures turbulentes, est estimée par :

$$\eta_k = (V^3/\varepsilon)^{1/4}$$

L'échelle temporelle correspondante par :

$$\tau_k = \left(\frac{V}{\varepsilon} \right)^{1/2}$$

Où ($\varepsilon = K^{1/2} / I_t$) représente le taux de dissipation de la turbulence, *Tennekes et Lumley* (1983).

Ces paramètres sont utilisés pour déterminer le temps chimique global $\tau_c = \delta_L/u_L$ et la valeur du critère de Klimov-Williams qui peut être évaluée comme étant égal à τ_c/τ_k ainsi que le nombre de Damköhler $Da = \tau_t/\tau_c$ [30].

III.4.2. Flammes turbulente non- pré mélangée :

D'après la littérature, on peut classer la combustion turbulente non pré-mélangée en deux groupes :

Celles qui utilisent les paramètres (Reynolds, Damköhler), ((Libby et Williams 1994) et celles travaillant avec le couple (Fluctuations, fraction de mélange, Damköhler), (Bray et Peters, 1994). Nous proposons ici une classification (Reynolds, Damköhler)[31].

Lorsque la turbulence n'est pas trop forte, la structure de la flamme de diffusion est celle d'une flamme plissée, elle est alors constituée d'une longue flammelette continuellement plissée, étirée et comprimée, alternativement par le mouvement turbulent,

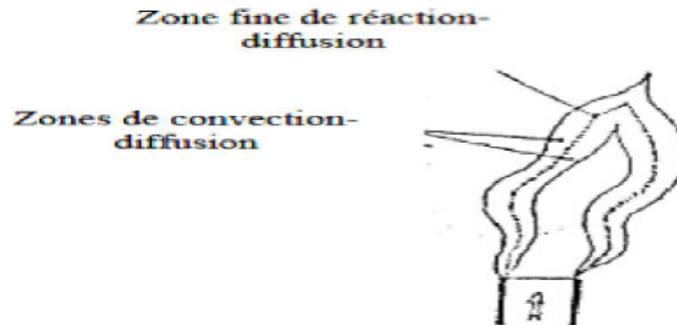


Figure. III. 5. Flamme de diffusion faiblement turbulente.

Lorsque la turbulence devient assez forte, deux phénomènes peuvent se produire :

- D'une part la turbulence peut étirer la flammelette de telle façon que celle-ci s'éteigne à l'endroit où elle est suffisamment étirée d'où on rencontre plusieurs flammelette séparées par la zone de d'extinction et celle-ci apparaît lorsque τ_c/τ_k
- D'autre part, une turbulence trop forte va provoquer aussi des interactions entre deux portions de flammelette. Les grandes échelles feront interagir deux portions assez éloignées et cela formera des boucles de flammelette.

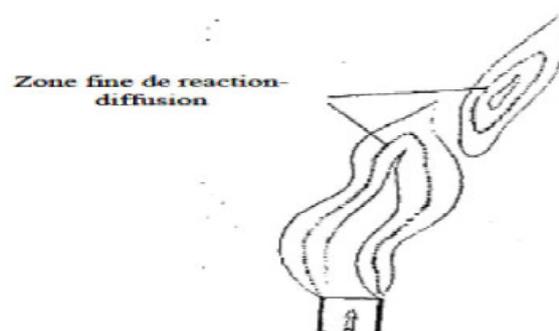


Figure. III. 6. Interaction à grande échelle de flammelettes.

Les petites échelles spatiales proches de l'épaisseur de la flammelette entraîneront un épaissement local de celle-ci. La zone de réaction referme sur elle-même figure. Les petites échelles de taille η sont semblables à l'épaisseur de la flammelette de diffusion.

Chapitre IV

Modélisation physique d'une flamme de diffusion turbulente

IV.1. Introduction :

Ces dernières années, la simulation numérique et essentiellement la CFD (Computational Fluid Dynamics) est devenue un outil primordial dans le procédé de conception des applications efficaces économiquement et écologiquement. Les applications techniques basées sur la combustion font intervenir la simulation numérique pour prédire les champs dynamiques de l'écoulement, les quantités de chaleur dégagées et les gaz produits. Ces informations sont très intéressantes pour l'optimisation de ces applications.

La combustion fait intervenir plusieurs espèces qui réagissent à travers plusieurs réactions élémentaires (mécanismes réactionnels).

IV.2. Equations de conservation pour les écoulements réactifs :**IV.2.1. Equation de conservation de la masse :**

L'équation qui exprime la conservation de la masse est donnée par suivant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (\text{IV.1})$$

u_i : est la composante de vecteur vitesse selon l'axe i

IV.2.2. Equation de conservation des espèces chimique :

La détermination de la fraction massique pour chaque espèce, Y_k , se fait la solution de l'équation de transport de la $k^{ième}$ espèce, qui est de la forme suivante :

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_k) = \frac{\partial (J_j^k)}{\partial x_j} + \dot{\omega}_k \quad (\text{IV.2})$$

Dans le cas d'un écoulement gazeux, on néglige généralement la diffusion de masse par gradient de température et par gradient de pression.

La diffusion moléculaire s'effectue uniquement par gradient de concentration, elle peut être modélisée par la loi de Fick :

$$J_j^k = -\rho D_k \frac{\partial (Y_k)}{\partial x_j} \quad (\text{IV.3})$$

$\dot{\omega}_k$: Est la taux ou vitesse de réaction de l'espèce k donne par la loi empirique d'Arrhenius:

$$\dot{\omega}_k = A_k T^{\beta k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) = A_k T^{\beta k} \exp\left(-\frac{T_{a,k}}{T}\right) \quad (\text{IV.4})$$

Avec :

A_k : Est le facteur pré-exponentiel.

$T_{a,k}$: La température d'activation.

E_k : L'énergie d'activation.

La température d'activation est donnée par la relation : $T_{a,k} = E_k/R$

IV.2.3. Equation de la quantité de mouvement :

L'équation de la quantité est donnée comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho F_i \quad (\text{IV.5})$$

τ_{ij} : Désigne le tenseur des forces visqueuses.

F_i La force de volume agissant à distance sur le fluide.

$$\text{Avec : } \tau_{ij} = \left[u_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \right] \quad (\text{IV.6})$$

IV.2.4. Equation de conservation de l'énergie :

C'est l'équation la plus affectée par la combustion, elle peut être écrite sous plusieurs formes, une des plus utilisées est celle de l'enthalpie sensible :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h_t) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho h_t u_j) = \dot{\omega}_t + \dot{Q} + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_k \right) \quad (\text{IV.7})$$

Le flux d'énergie $\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)$ est le terme de diffusion de chaleur exprimé par la loi de Fourier.

Un second terme $\left(\rho \sum_{k=1}^N V_{k,i} Y_k h_k \right)$ associe la diffusion de différentes espèces avec des enthalpies différentes.

Le terme \dot{Q} représente la source de chaleur due par exemple à un laser ou un arc électrique.

Le terme $\dot{\omega}_t$ est le dégagement de chaleur dû à la combustion il est donné par :

$$\dot{\omega}_t = - \sum_{k=1}^N \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (IV.8)$$

IV.3. Modèle de combustion :

IV.3.1. Modèle "Eddy Break-Up" [32] :

Le modèle "Eddy Break-Up" est basé sur l'analyse des prémélanges du régime des flammes plissées ou les phénomènes chimiques sont très rapides comparés aux phénomènes turbulents : $\tau_c \ll \tau_t$ et $\tau_c < \tau_\eta$. La zone de réaction est alors comme une collection de poches de gaz frais et de gaz brûlés séparées par des interfaces réactives. Le taux de réaction chimique moyen est donc contrôlé par le temps caractéristique de turbulence τ_t . Ce temps caractéristique peut être estimé de l'énergie cinétique turbulente k et taux de dissipation ϵ : $\tau_t = k/\epsilon$. Les travaux de Spalding [1955] ont abouti, après quelques modifications, à la relation suivante pour le taux de réaction chimique moyen :

$$\bar{\omega}_c = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \quad (IV.9)$$

Où C_{EBU} est la constante du modèle et de l'ordre de l'unité. La formule (2.6) a été justifiée théoriquement plus tard par Bray et Moss (1977) ce qui a permis de donner une interprétation physique à la constante C_{EBU} .

IV.3.2. Modèle EDM (Eddy Dissipation Model) [33] :

Dans le modèle EDM, le taux de progression de la réaction élémentaire est déterminé par le minimum des limiteurs suivants.

- **Limiteur de réactifs** : Ce limiteur vérifie l'existence des réactifs pour avoir une réaction (un taux de réaction), ces réactifs doivent être dans les proportions d'inflammabilité.

$$R_k = A \frac{\epsilon}{k} \min \left(\frac{[I]}{V'_{kl}} \right) \quad (IV.10)$$

Où A est un coefficient à caler selon la géométrie et le combustible, $[I]$ est la concentration molaire de l'espèce I avec k parcourant seulement les réactifs.

- **Limiteur de produits** : Ce limiteur a pour but de vérifier la présence des produits de combustions, le taux de réaction sera nul s'il n'y a pas de produits de combustion.

$$R_k = AB \frac{\varepsilon}{k} \min \left(\frac{\sum_P [I] W_I}{V'_{kl} W_I} \right) \quad (IV.11)$$

B est un coefficient, l'indice P parcourt tous les produits dans la réaction élémentaire k.

IV.3.3. Modèles en fonction de densité de probabilité PDF :

La fonction de densité de probabilité (PDF) est souvent utilisée pour considérer la probabilité de distribution de la quantité stochastique. En écoulement turbulents, la fonction de densité de probabilité P est fonction de la position dans l'espace x et du temps t. Alors,

$$P = (u; x, t) dU \quad (IV.12)$$

Signifie la probabilité de trouver à la position x et au temps t une valeur u dans l'intervalle

$$U \leq u \leq U + dU.$$

Si P est connue, la valeur moyenne d'une quantité est définie par le moment d'ordre un

$$\bar{u} = \int_{-\infty}^{+\infty} u P (u; x, t) \quad (IV.13)$$

En plus des quantités de l'écoulement, les gradients peuvent être aussi inclus dans la PDF jointe. Cette description stochastique a plusieurs avantages théoriques [7]

- La PDF peut être définie dans n'importe quel champ d'écoulement turbulent.
- Elle contient toute l'information pour décrire un écoulement instationnaire et réactif.
- Ces fonctions peuvent être aussi extraites des données expérimentales et des simulations DNS.

IV.3.3.1. Approche par la PDF présumée :

En général, une fonction PDF peut avoir plusieurs formes et présenter plusieurs extrêmes. Elle contient l'information sur la variable moyenne, sur sa variance et aussi sur tous les moments d'ordre supérieur. Pour plusieurs applications de la combustion, les fonctions PDF présentent des caractéristiques communes, ce qui fait que ces fonctions peuvent être décrites en utilisant un nombre de paramètres limité [7].

La PDF la plus populaire est celle proposée par Borghi, dite fonction β :

$$\tilde{P}(c) = \frac{1}{B(a,b)} c^{\alpha-1} (1 - c)^{b-1} = \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} c^{\alpha-1} (1 - c)^{b-1} \quad (IV.14)$$

Où B (a,b) est un facteur de normalisation nommée fonction eulérienne bêta qui n'existe que si a>0, b>0, défini par :

$$B(a, b) = \int_0^1 c^{a-1}(1-c)^{b-1}dc \quad (IV.15)$$

La fonction Γ , fonction eulérienne de seconde espèce est définie par :

$$\Gamma(x) = \int_0^\infty e^{-t}t^{x-1}dt \quad x > 0 \quad (IV.16)$$

Souvent tabulée ou trouvée dans les bibliothèques scientifiques.

Les paramètres de la PDF a et b sont déterminés à partir de la valeur moyenne de \tilde{c} et de sa \tilde{c}^2 variance par

$$\begin{aligned} a &= \tilde{c} \left[\frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\tilde{c}^2} - 1 \right] \\ b &= \frac{a}{\tilde{c}} - a \end{aligned} \quad (IV.17)$$

Les fonctions β sont généralement utilisées pour présumer les PDF car elles sont capables de changer continument d'une forme PDF avec un ou deux pics à une forme gaussienne. Cette approche simplifiée est utilisé dans la simulation de quelques applications industrielles. Une équation de la variable d'avancement c et de sa \tilde{c}^2 variance sont nécessaires pour calculer les paramètres de la PDF.

IV.3.3.2. Approche par la fonction de densité de probabilité PDF transportée :

Une équation du bilan est écrite pour la fonction de densité de probabilité .Pour une PDF multi espèces pondérée par la mass

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \tilde{\rho} \tilde{u}_k \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_k} &= - \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\overline{\tilde{\rho}(\mathbf{u}_k^n | Y = c)} \tilde{P} \right] - \bar{\rho} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{\partial}{\partial c_i} \frac{\partial}{\partial c_j} \left[\overline{D \left(\frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \middle| Y = c \right)} \tilde{P} \right] - \\ &\bar{\rho} \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial c_i} \left(\dot{\omega}_i(c_1, c_2; \dots; c_n) \tilde{P} \right) \end{aligned} \quad (IV.18)$$

$\overline{(Q|Y=c)}$ Correspond à la prise de la moyenne conditionnelle de Q pour les valeurs d'échantillonnage c_i . Les trois premiers termes dans l'équation (IV.18) correspondent respectivement à l'évolution instationnaire, convection par l'écoulement moyen et convection par le mouvement turbulent. Ces termes convectifs décrivent la PDF dans l'espace physique (i.e. champ d'écoulement). Les deux derniers termes correspondent respectivement au mélange moléculaire et la réaction chimique et décrivent la PDF dans l'espace de composition (c_i), à cause du mélange et de la combustion.

Le plus grand intérêt dans l'équation du bilan de la PDF est que le terme de la réaction chimique dépend seulement des variables chimiques et ne nécessite aucune modélisation. Ainsi, l'équation de la PDF transportée peut tenir compte de n'importe quel mécanisme chimique. Cependant, le terme du mélange moléculaire, exprimé comme une dissipation scalaire, est ouvert et difficile à modéliser [7].

IV.4. Modèle de turbulence k-ε :

L'objectif de ce modèle est de donner une fermeture, à une échelle intégrale l, pour le tenseur de Reynolds et pour les termes de transport turbulent dans les équations de Navier-stokes moyennées. Ce modèle utilise le principe de la viscosité turbulente μ_t qui est propriété du champ de l'écoulement turbulent et pas du mélange.

Le modèle k-ε standard est basé sur les équations de transport de l'énergie cinétique turbulente k et de sa dissipation e et est un modèle semi-empirique. L'équation modélisée de l'énergie turbulente est dérivée de l'équation exacte. Celle de la dissipation est obtenue sur la base d'un raisonnement physique. Dans ce modèle, l'écoulement est supposé complètement turbulent.

Pour calculer la viscosité tourbillonnaire μ_t le modèle $k - \varepsilon$ standard emploie la relation de Prandtl-Kolmogorov pour relier μ_t à k et à ε

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{IV.19}$$

k et ε Sont calculés avec les deux équation de transport suivantes :

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} k \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \bar{\rho} \varepsilon \tag{IV.20}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon \tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} G_k - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \left(\frac{\varepsilon^2}{K} \right) \tag{IV.21}$$

Avec $C_\mu; \sigma_k; \sigma_\varepsilon; C_{1\varepsilon}$ et $C_{2\varepsilon}$ Sont des constantes qui général prennent les valeurs présentées
En tableau. G_k représente la production d'énergie cinétique. G_k est donnée par l'expression :

$$G_k = \mu_t \left(\sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \right)^2 \tag{IV.22}$$

Avec :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \tag{IV.23}$$

G_b représente la génération de turbulence due à la force thermo gravitationnelle. G_b est évaluée avec l'expression :

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{IV.24}$$

Avec :

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \tag{IV.25}$$

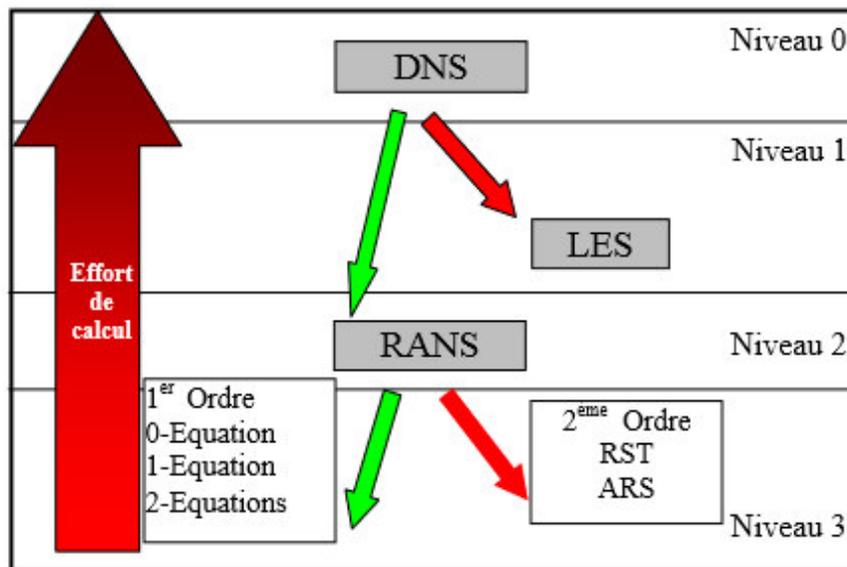
β , g_i et Pr_t représentent, respectivement, le coefficient d'expansion thermique, le vecteur gravitationnel dans la direction i et le nombre de Prandtl turbulent. Dans ce modèle, Pr_t est considéré égal à 0.85.

Table. IV.1. Constantes du modèle k-ε standard

$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_μ	σ_k	σ_ε	Pr_t
1,44	1,92	0,09	1,0	1,3	0,85

IV.5. Modélisation de la turbulence :

Dans un écoulement turbulent, les molécules bougent de façon aléatoire le long de trajectoires irrégulières. Le fort mouvement chaotique provoque le mélange intensif des couches de fluide. A cause de l'augmentation de l'échange de quantité de mouvement et d'énergie entre les molécules et les parois solides, les écoulements turbulents donnent dans les mêmes conditions, des échanges de chaleur et des frottements pariétales plus importants comparés aux écoulements laminaires. La simulation numérique des écoulements turbulents continue toujours à rencontrer des problèmes significatifs [7].



DNS: Direct Numerical Simulation. LES: Large Eddy Simulation. RANS: Reynolds Averaged Navier Stokes equations
 1er Ordre : Fermetures du premier ordre. 2ème Ordre : Fermetures du deuxième ordre.
 RST: Reynolds Stress Transport models. ARS: Algebraic Reynolds Stress models.
 0-, 1-, 2-Eq. = Zéro- (algébrique), une-, deux équations (modèle à).

Figure. IV. 1 Aperçu sur les différents modèles de turbulence.

IV.5.1. Simulation numérique directe (DNS) :

C'est l'approche la plus précise pour la simulation de la turbulence où les équations instantanées de Navier-Stokes sont résolues. Aujourd'hui, les études DNS sont restreintes sur des petites géométries avec des faibles nombres de Reynolds. Cependant, la DNS devient un outil précieux pour la compréhension des écoulements turbulents avec ou sans réaction, ses solutions permettent une analyse profonde des phénomènes isolés et interviennent dans le développement des modèles.

IV.5.2. Simulation numérique des grandes échelles (LES) :

La LES est basée sur l'observation des petites structures turbulentes qui ont un caractère plus universel que les grandes. L'idée est de calculer la contribution des grandes échelles énergétiques, responsables du transfert de la quantité de mouvement et d'énergie, et de modéliser l'effet des petites structures qui ne sont pas résolues par le schéma numérique. Vu le caractère universel et homogène des petites structures, on peut s'attendre que les modèles dits de sous mailles soient plus simples que les modèles pour les équations RANS. L'approche LES représente la solution instationnaire tridimensionnelle des équations. Cela fait que la LES peut résoudre des problèmes d'engineering à prix raisonnable.

IV.5.2.1. Fermetures du premier ordre :

Ce type de fermetures représente la méthode la plus facile pour approximer les contraintes de Reynolds. Elles sont basées sur le principe de la viscosité turbulente de Boussinesq qui s'écrit pour de la moyenne de Favre et de Reynolds des équations de Navier-Stokes :

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = 2\mu_t \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} u_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{2}{3} \tilde{\rho} \tilde{k} \delta_{ij} \quad (\text{IV.26})$$

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{IV.27})$$

IV.5.2.2. Fermetures du second ordre :

Il est possible de dériver des équations exactes pour les contraintes de Reynolds en prenant la moyenne temporelle (moment du second ordre).

$$\overline{u_i' N(u_j') + u_j' N(u_i')} = 0 \quad (\text{IV.28})$$

Où $N(u_i)$ est l'opérateur Navier-Stokes, i.e.,

$$N(u_i) = \rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} - \mu \nabla^2 u_i \quad (\text{IV.29})$$

En utilisant la moyenne Eq (IV.28) avec l'éq (IV.29), on obtient l'équation du transport des contraintes de Reynolds pour un écoulement incompressible donnée par :

$$\frac{\partial \tau_{ij}^R}{\partial t} + u_k \frac{\partial \tau_{ij}^R}{\partial x_k} = P_{ij} \Pi_{ij} - \varepsilon_{ij} - \frac{\partial C_{ijk}}{\partial x_k} + u \nabla^2 \tau_{ij}^R \quad (\text{IV.30})$$

Avec P_{ij} est la production de l'énergie cinétique de turbulence, Π_{ij} le terme des contraintes de pression, ε_{ij} le terme du taux de dissipation et C_{ijk} est le terme de diffusion du troisième ordre, ils sont donnés par :

$$P_{ij} = -\tau_{ij}^R \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} - \tau_{ij}^R \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k} \quad (\text{IV.31})$$

$$\Pi_{ij} = p' \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) = 2\overline{p'S'_{ij}} \quad (IV.32)$$

$$\varepsilon_{ij} = 2\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \quad (IV.33)$$

$$C_{ijk} = \rho \overline{u'_i u'_j u'_k} + \overline{p' u'_i} \delta_{jk} + \overline{p' u'_j} \delta_{ik} \quad (IV.34)$$

La partie S'_{ij} est la partie fluctuante du tenseur de contraintes. La première partie de C_{ijk} est le terme de triple vitesse, il représente le transport par la convection fluctuante. Les deux autres termes sont les termes de transport de pression (corrélation vitesse pression). On remarque que l'équation des contraintes de Reynolds contient une autre inconnue d'ordre supérieur ($u'_i u'_j u'_k$). L'équation peut être fermée par une formulation empirique, cela est du à la nature non linéaire des équations de Navier-Stokes.

IV.5.3. Equations de Navier-Stokes moyennes de la turbulence :

La turbulence est un phénomène stochastique, une description statistique de la turbulence est nécessaire. D'un point de vue engineering, seulement la moyenne et la variance d'une quantité sont d'un intérêt primaire. Toutes les quantités fluctuantes sont divisées en une partie moyenne et fluctuante.

$$U = \overline{U} + U' \quad (IV.35)$$

U' :Indique la fluctuation.

Les quantités moyennes sont calculées par une moyenne d'ensemble sur toutes les réalisations U_k , $k= 1,2, \dots, n$ de cette quantité à un point fixe de l'espace et lu temps.

$$\overline{U}(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n U_k(x, t) \right) \quad (IV.36)$$

Dans les écoulements avec gradients importants de densité, une moyenne pondérée par la masse, dite moyenne de Favre est souvent préférée.

$$U = \overline{U} + U'' \quad (IV.37)$$

Avec :

$$\overline{U} = \frac{\overline{\rho U}}{\rho} \quad (IV.38)$$

Ici, le tilde montre la moyenne de Favre qui est utilisée pour simplifier l'écriture des équations dans les cas des écoulements à densité variable. La double prime montre la fluctuation de Favre de la quantité.

L'application cette moyenne aux équations de Navier- Stokes réactives donne :

Equation de continuité :

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \nabla(\overline{\rho \tilde{u}_i}) = 0 \quad (IV.39)$$

Equation de conservation des espèces :

$$\frac{\partial \overline{\rho \tilde{Y}_k}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{V_{k,i} \tilde{Y}_k} + \overline{\rho u_i'' \tilde{Y}_k''}) = \dot{w}_k \quad (V.40)$$

Pour : k = 1, N

Equation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = \frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \rho F_i + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (IV.41)$$

$(-\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$: La force génère par la turbulence.

$(\rho u_i u_j)$: Transport convectif.

ρF_i : La force de volume.

Où les $-\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ sont les composantes du tenseur des contraintes de Reynolds.

$$-\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j = u_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + u_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (IV.42)$$

Equation d'enthalpie :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \overline{\rho \tilde{h}_s}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \tilde{u}_i \tilde{h}_s}) = \\ \check{\omega}_t + \frac{\overline{DP}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \overline{\rho u_i'' h_s''} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho \sum_{k=1}^N V_{ki} Y_k h_{sk}}) \end{aligned} \quad (IV.43)$$

Avec :

$$\frac{\overline{DP}}{Dt} = \frac{\partial \overline{P}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} = \frac{\partial \overline{P}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} + u_i'' \frac{\partial \overline{P}}{\partial x_i} \quad (IV.44)$$

Chapitre V

Modélisation numérique sous Fluent

V.1.Introduction :

CFD est simplement le calcul numérique appliqué à la mécanique des fluides. Cela consiste à résoudre dans une géométrie donnée l'équation fondamentale de la mécanique des fluides, que l'on peut éventuellement coupler aux équations de Transfer thermique et des réactions chimiques. Le mot CFD est un acronyme du mot anglais Computational Fluid Dynamics, le mot Computational fait à l'analyse numérique, aux mathématiques et aux calculs numérique, et Fluid Dynamics à la dynamique des fluides.

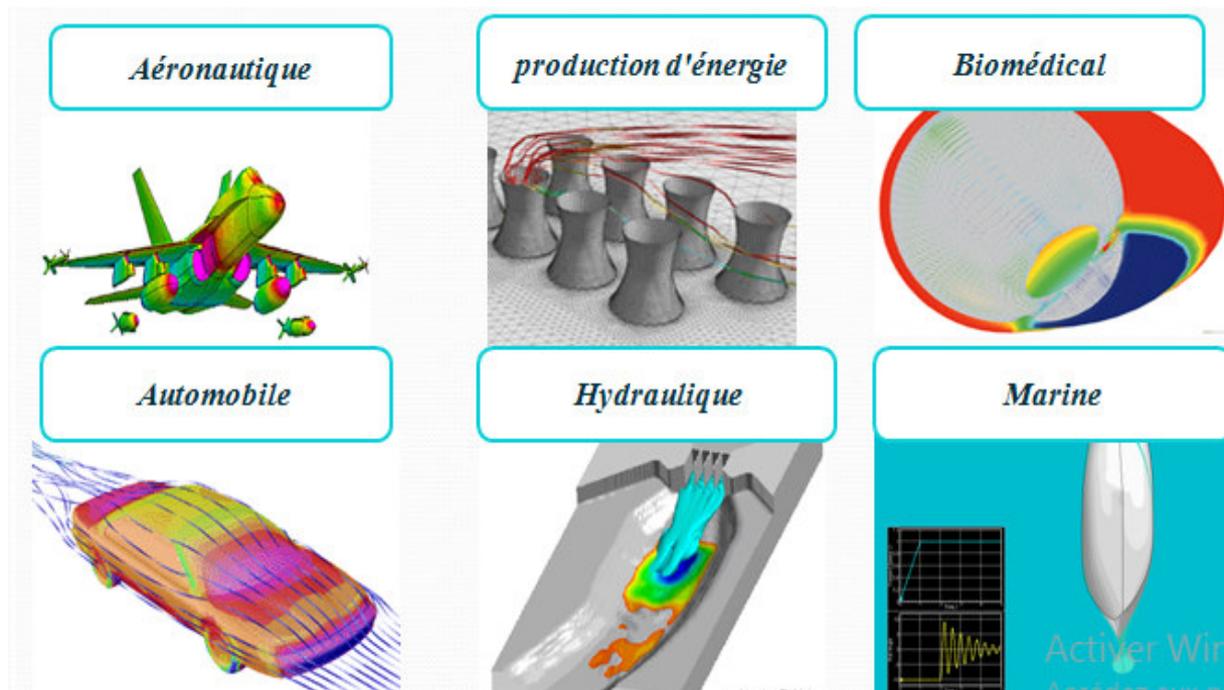


Figure. V.1. Domaine application de CFD.

V.2. Définition du Gambit –Fluent :

Logiciel Gambit permet de créer des géométries et mailler des domaines de géométrie d'un problème de CFD. Ces maillages pouvant être utilisés en particulier sous le solveur Fluent.

Il permet de générer un maillage structuré ou non structuré en coordonnées cartésiennes, polaires, cylindriques ou axisymétriques. Il peut réaliser des maillages complexes en deux ou trois dimensions avec des mailles de type hexahedrale ou tetrahedrale.

Fluent est un logiciel commercial qui permet de faire des simulations numériques découlements de fluides, mais pas seulement. En effet, le logiciel permet de traiter des phénomènes liés à un écoulement comme le transfert de chaleur et de masse ou la

combustion. Le fluent est actuellement produit par la compagnie américaine ANSYS, et il présenté comme l'un des leaders mondiaux en simulation numérique des écoulements fluides (CFD). Il est utilisé dans plusieurs domaines : Aéronautique, automobile, génie des procédés, énergie éolienne, thermique bâtiment et biomécanique...etc.

V.2.1. Architecture du logiciel :

Nous avons réalisé nos calculs avec le logiciel commercial ANSYS FLUENT. Le choix se justifier par la disponibilité ; la convivialité et l'usage très répandu de ce dernier en mécanique des fluides ; notamment dans les domaines universitaire et industriel.

Comme tout logiciel de CFD ; il est composé de trois éléments : Le préprocesseur ; le solveur et le post processeur.

- La définition du problème à résoudre s'effectue à l'aide du préprocesseur Gambit. Il permet de représenter la géométrie du système ; de définir le type de condition aux frontières du domaine de spécification le type de matériau fluide ou solide. Il fournit aussi la possibilité de discrétiser le domaine, en proposant plusieurs algorithmes de maillage suivant sa géométrie.
- Le solveur permet d'importer et adapter le maillage et de définir numériquement les conditions opérations (gravité, pression) dans lesquelles est effectuée la simulation, Aussi, il permet de choisir le processus itératif, en proposant notamment plusieurs schémas numériques pour la description spatiale et temporelle, et pour le couplage de la vitesse et de la pression.
- Le post processeur est l'élément qui permet de visualiser la géométrie et le maillage, de visualiser les champs de vecteur vitesse, les champs de pression et de turbulence ainsi que toutes les grandeurs calculées sur un segment, une section du domaine ou sur tout le volume

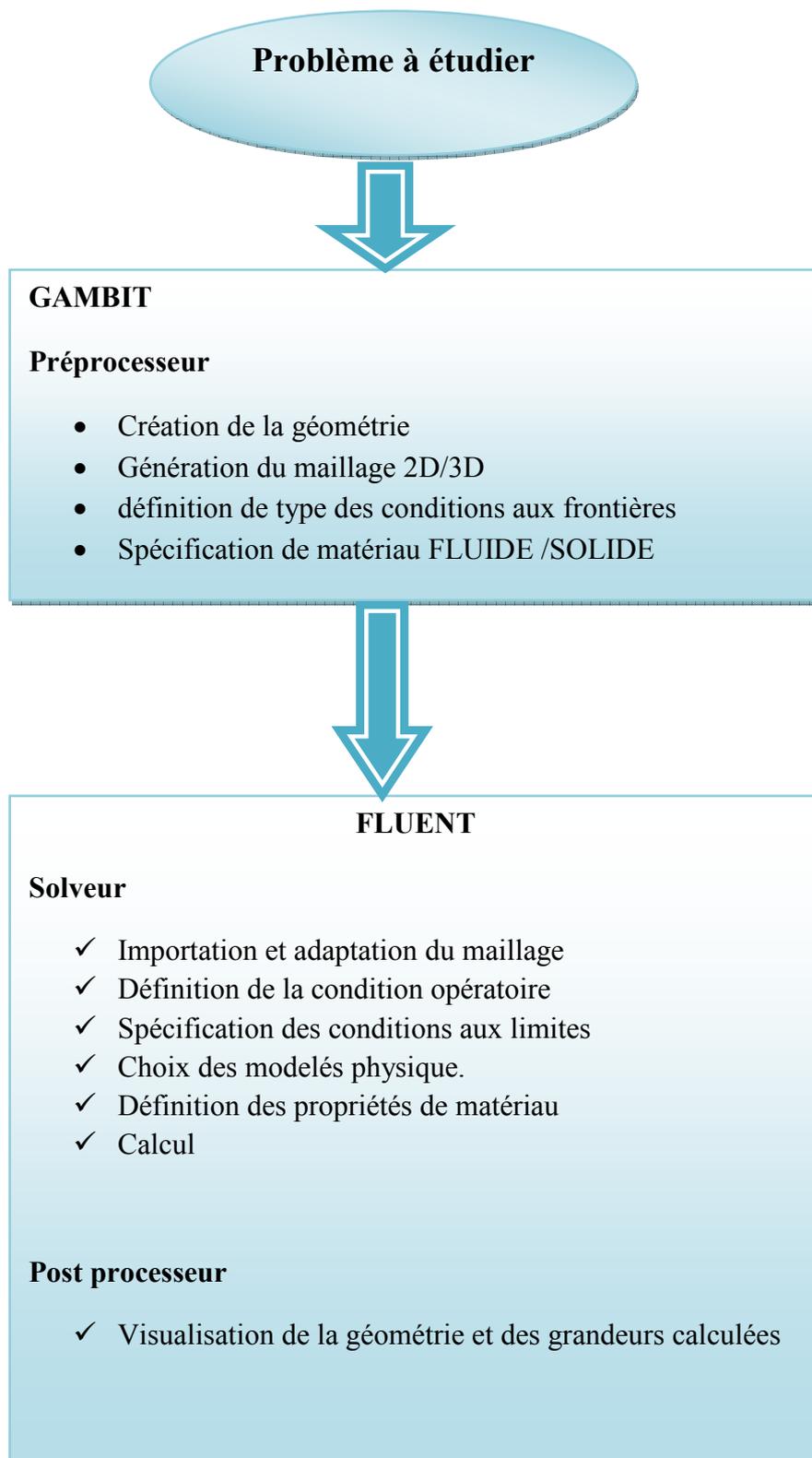


Figure. V.1. Présentation des éléments du logiciel

V.3.Géométrie du problème :

La géométrie de la configuration considérée (**figure V.2**) est une chambre de combustion avec une longueur de 1000mm et 250 mm de largeur,

Le modèle axisymétrique de la chambre de combustion contient deux entrées Fuel (H_2/ CH_4) et d'air, des parois de chambre et d'injecteur non adiabatiques et d'une sortie de gaz brûlée.

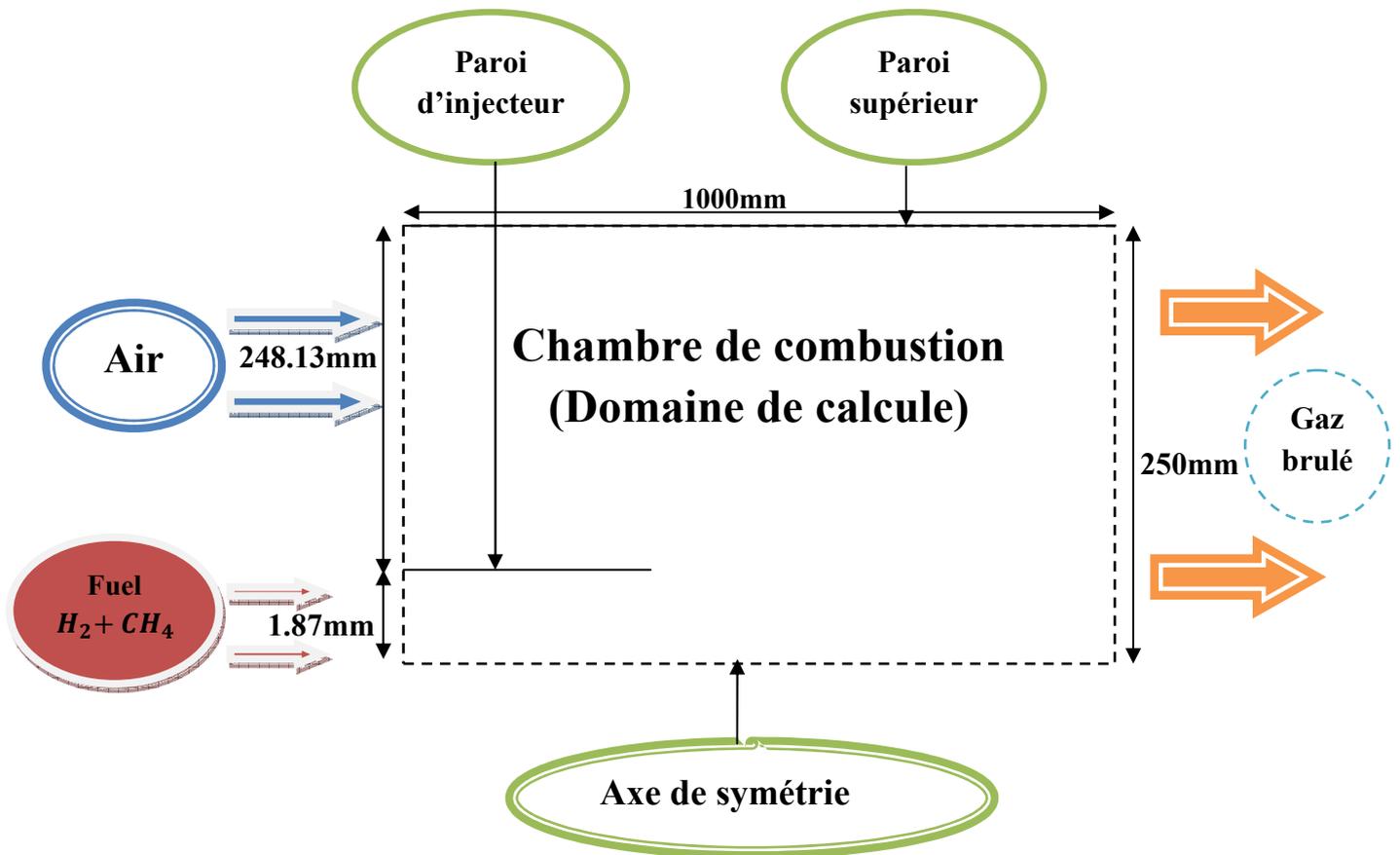


Figure. V.3. La géométrie de la configuration

V.3.1.Conception de la géométrie et génération de maillage :

Le premier travail à accomplir dans une simulation numérique est la conception de la géométrie et le choix du maillage adapté à la nature de l'écoulement en particulier le maillage doit être fin dans les zones où l'on attend des gradients très importants des grandeurs physique."Fluent" traite plusieurs types de maillages très compliqués qui sont en général importés directement d'autres logiciels de génération de maillages « GAMBIT » [34] .

La définition de la géométrie et la génération du maillage ont été réalisées suivant les étapes (voir la partie Annexe), la géométrie a été dessinée possible grâce au logiciel de conception de géométrie GAMBIT. Le maillage quadratique structuré a été utilisé dans ce travail.

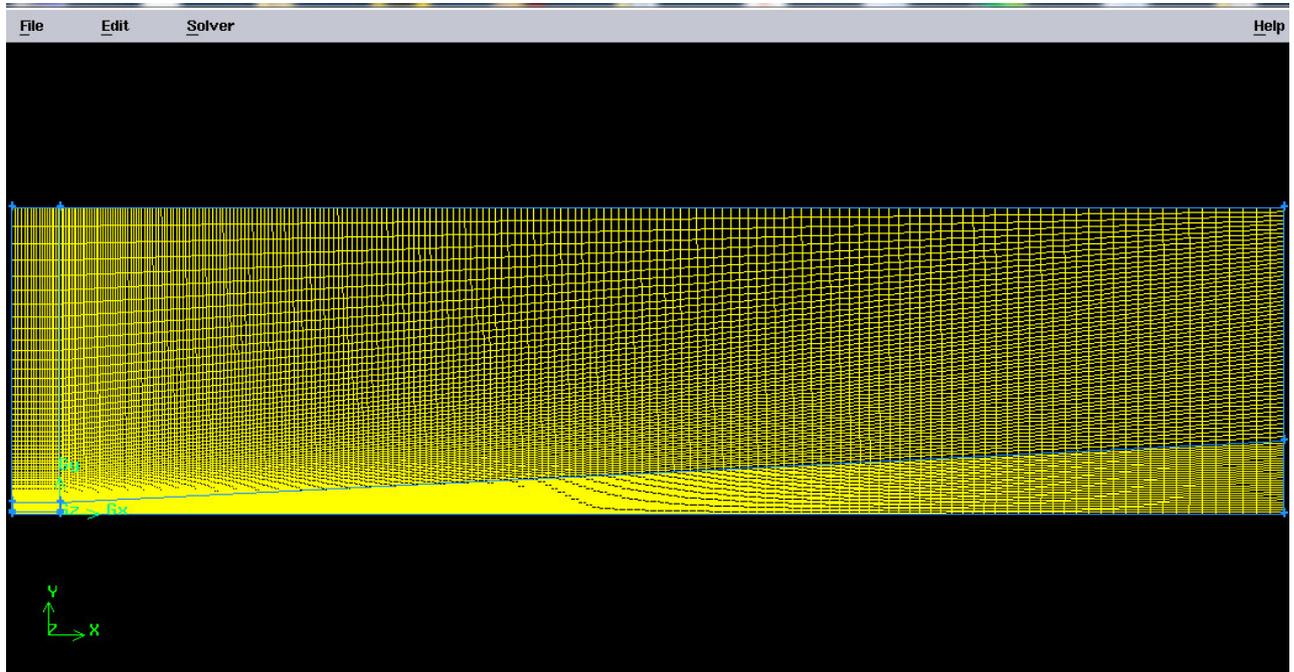


Figure. V.4. Aperçue du maillage utilisé.

V.4. Définition des conditions aux limites :

La résolution numérique de l'équation de transport nécessite la définition des conditions initiales et aux limites, comme suit:

- **Entrée Fuel($H_2 + CH_4$) :**

L'entrée de Fuel est liée au débit mètre ou une vitesse **50m/s**. Nous avons imposé la condition **velocity_inlet** et une température de l'écoulement entrant **300k**. Les conditions ne change pas pour tous les cas de carburant des pourcentages hydrogène/méthane :

(100 % CH_4 ; 0 % H_2) ; (90 % CH_4 ; 10% H_2) ; (80 % CH_4 ; 20 % H_2) ;(70 % CH_4 ; 30 % H_2) ;

(50 % CH_4 ; 50 % H_2) ; (0 % CH_4 ; 100% H_2).

- **Entrée oxydant (air) :**

L'air est ouvert à l'atmosphère est entrée à la vitesse **1 m/s** nous avons imposé la condition **velocity- inlet** ; et une température de l'écoulement d'air entrant **300k**.

- **Sortie de gaz brûlée :**

Par contre à la sortie de gaz brûlée est ouvert à l'atmosphère ; la condition **pressure_outelet** a été imposé.

Le maillage de la géométrie est présenté par la **Figure. V.4**, notant que le nombre de nœuds est de 18834 nœuds, ce qui confirme notre choix du modèle turbulent.

Tableau. V.1. Les conditions aux limites sous Gambit.

Nom	Type de condition	Nature
Fuel : combustible($H_2 + CH_4$)	Velocity_inlet	Fluid
Coflow : (air)	Velocity_inlet	Fluid
Coflow2 : (air)	Velocity_inlet	Fluid
Outlet : (gaz brûlée)	Pressure_out	Fluid
Outlet2 : (gaz brûlée)	Pressure_out	Fluid
Axis : (Axe de symétrie)	Axis	Fluid

Un raffinement des zones au voisinage de l'entrée et l'axe de symétrie de la chambre de combustion a été pris en compte pour capter les différents phénomènes qui peuvent intervenir dans ces zones.

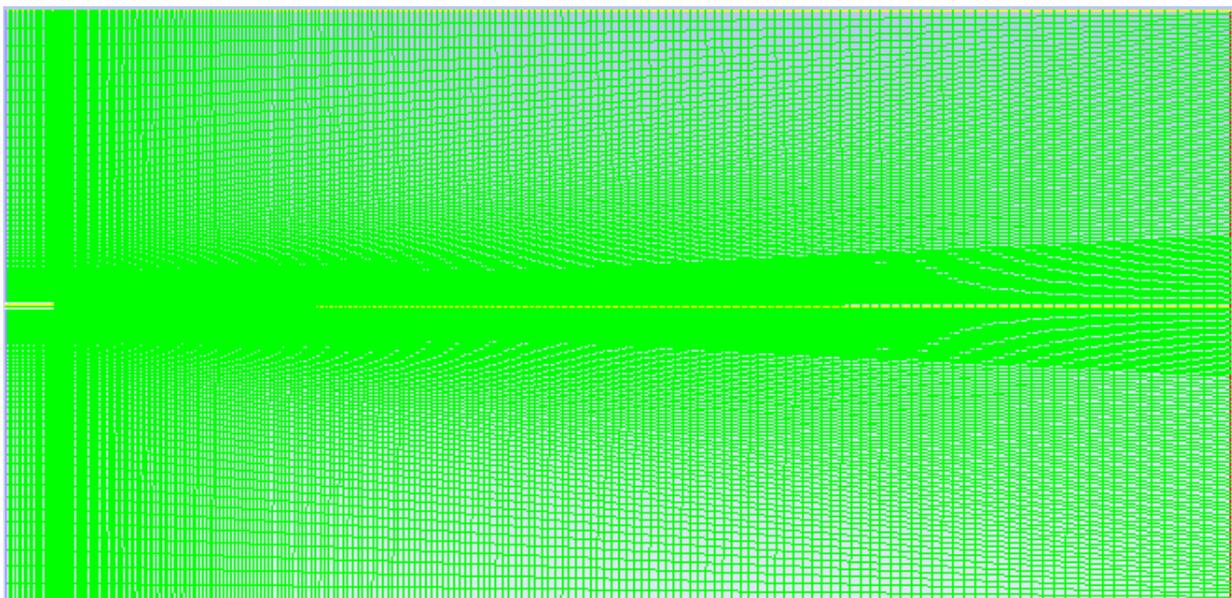


Figure. V.5. Maillage de la géométrie

Nous avons choisi les modèles pour la simulation comme suit :

- ✓ Pour la simulation de la turbulence nous avons choisis le **modèle k- ϵ standard** car il présente l'avantage d'être adapté à ce type d'écoulement et est robuste et économique et relativement précis.
- ✓ Pour le modèle de combustion on utilise le **modèle PDF (conserved scalar PDF model)**, basé sur la fonction densité de probabilité avec le schéma cinétique représentant au mieux la chimie de la combustion du méthane enrichi à l'hydrogène, nous avons utilisé le **mécanisme détaillé GRIMech 3.0**.
- ✓ **GRIMech 3.0** convient aussi pour la combustion du méthane enrichi à l'hydrogène puisque son processus chimique inclut aussi la chaîne d'oxydation de l'hydrogène.

Les détails de l'implémentation du maillage dans Fluent sont donnés dans l'**annexe**.

Chapitre V

Résultats et discussions

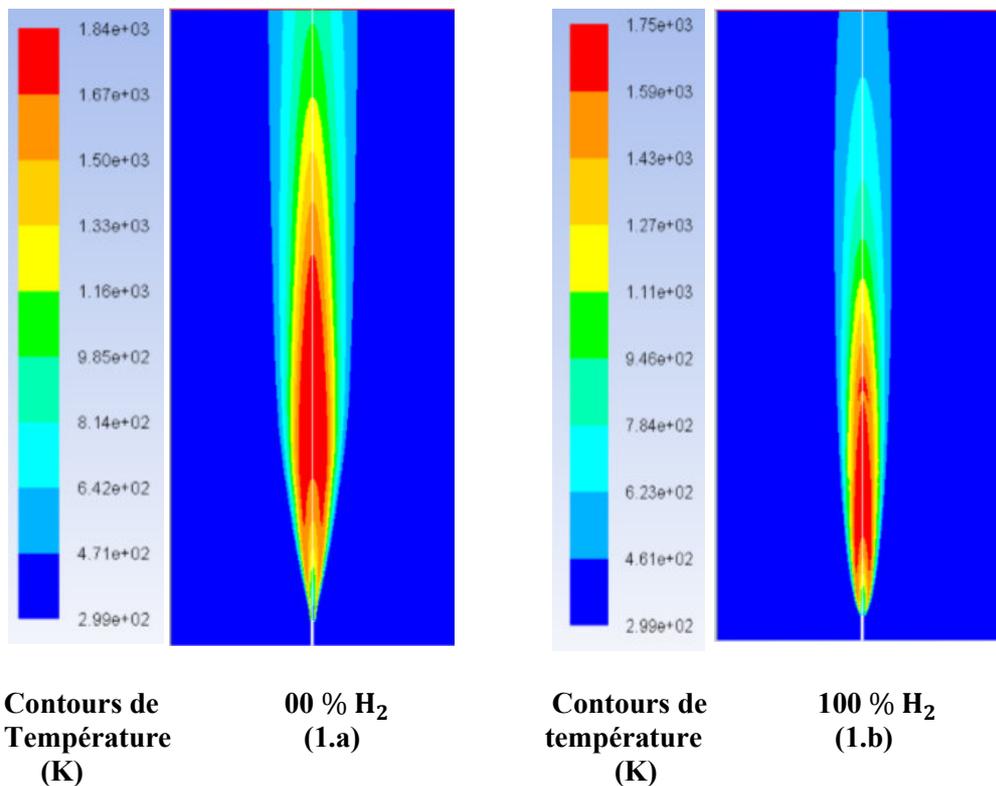
VI.1. Introduction :

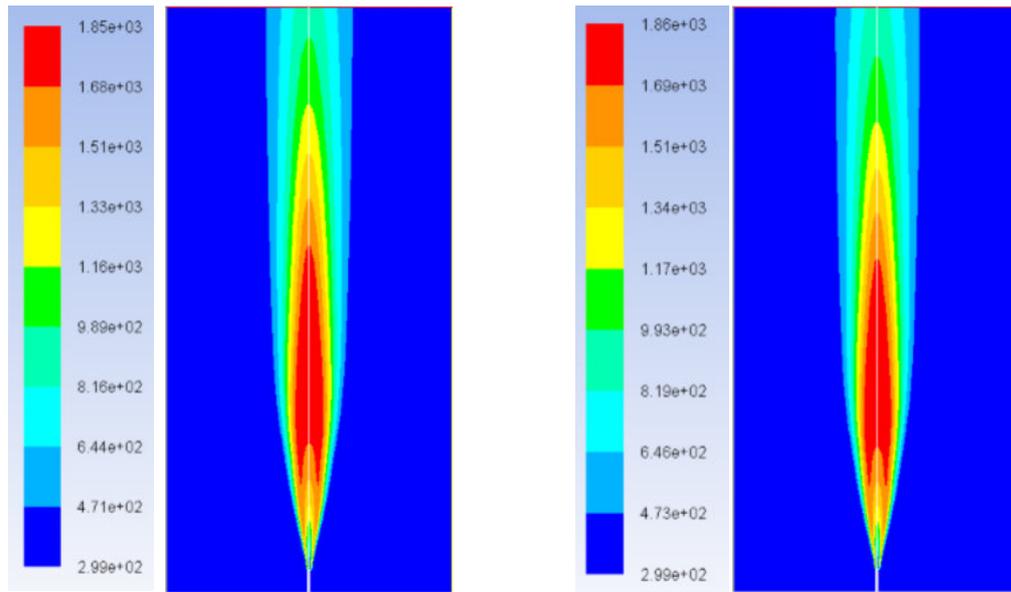
Les résultats obtenus lors de l'ajout d'hydrogène au méthane comme carburant dans le moteur à combustion interne, et à différents fractions [0 à 50%], ont été obtenus à partir de la modélisation sous le logiciel Fluent.

VI.2. Résultats et discussions :

Dans cette partie on va varier les fractions d'hydrogène et voir son effet sur la température, la vitesse, et les fractions massiques de H_2 , CH_4 , NO , CO , et OH en fonction de la distance axiale (mm).

VI.2.1. L'effet de l'ajout de l'hydrogène sur la température de combustion :



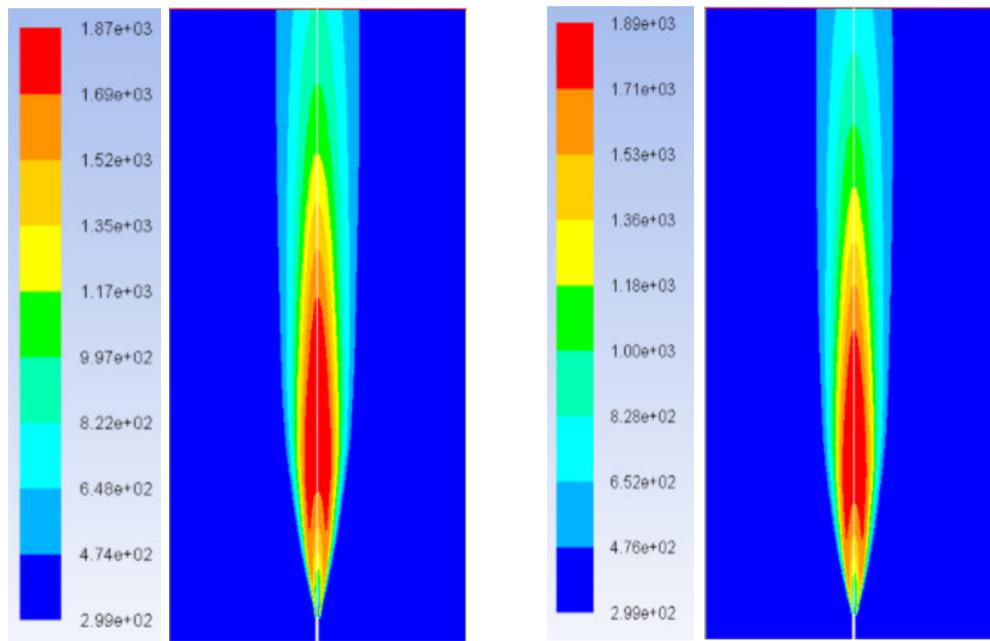


Contours de
Température
(K)

10 % H₂
(1.c)

Contours de
température
(K)

20 % H₂
(1.d)



Contours de
Température
(K)

30 % H₂
(1.e)

Contours de
température
(K)

50 % H₂
(1.f)

Figure. VI.1. les iso-contours de la température de la flamme pour les différents pourcentages de l'hydrogène.

D'après la figure 1, on remarque que la longueur de la flamme dans le cas du méthane pur (1.a) est nettement supérieure à celle du hydrogène pur (1.b) 100 %, on notera température maximale du méthane pur (1844 K) est de plus importante que celle pour l'hydrogène pur (1755K).

VI.2.2. Les profils de température pour des différents pourcentages d'hydrogène :

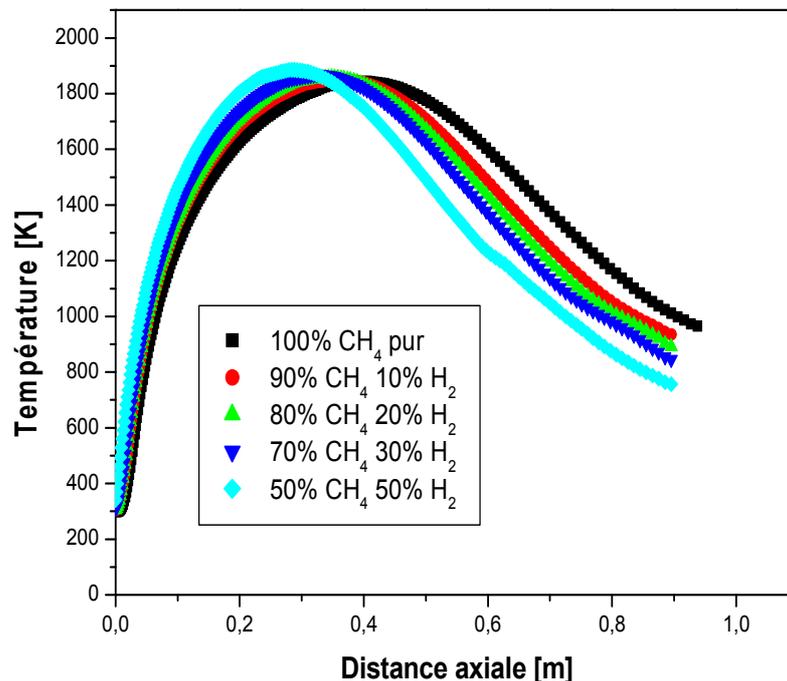


Figure. VI.2. Les profils de température en fonction de la distance axiale pour différentes concentrations d'H₂

On remarque que lors de l'ajout d'hydrogène au méthane, les températures augmentent. Les valeurs des hautes températures sont situées dans la zone de la flamme pour les combustibles de l'hydrogène et de méthane. Même zone de réaction chimique et ces réactions sont considérées comme des réactions exothermiques. La valeur de température diminue à mesure que nous nous éloignons de la zone de flamme [35].

L. ziani et al [8] ont fait une étude sur la simulation non prémélange de combustion turbulent en mélange CH₄-H₂ ont utilisant le model PDF, ils ont conclu que l'addition d'hydrogène entraîne une augmentation de la température de combustion.

Des tendances similaires ont été observées par Alliche et al[9] qui ont remarqué que plus la température d'entrée est grande plus la flamme s'accroche au bec d'injection, ce qui peut représenter un danger par la fusion du bec si le temps résiduel dépasse une certaine limite, la longueur de la flamme diminue avec l'augmentation de la température de l'hydrogène d'entrée, et la température augmente continuellement au cours de l'avancement vers la fin du tube pour une faible vitesse d'entrée d'air.

L'augmentation des températures indiquée que la longueur de la flamme a diminué (figure 1) progressivement avec l'augmentation de l'addition de différents pourcentages d'hydrogène ceci est dû à la réactivité du mélange méthane/hydrogène. En effet l'hydrogène est un gaz très réactif, une fois mélangé avec le méthane, la réactivité du mélange augmente et par conséquent la résistance de la flamme à l'étirement et à la stabilité augmente.

F. Khaladi et al [11] ont étudié la simulation numérique de flamme non prémélange CH₄-H₂-AIR, ils ont montré que pour le meilleur pourcentage d'addition d'hydrogène serait a priori de 50%.

P. Kumar et al [36] ont montré par étude expérimentale pour les effets de l'hydrogène sur la température du gaz et sur la propagation de la flamme, les résultats indiquent que l'addition de H₂ à 20% ne montre aucun changement dans la longueur de la flamme. Cependant, lorsque le niveau d'hydrogène varie de 20% à 40%, la longueur de la flamme diminue, ce qui peut s'expliquer par l'augmentation de la température de la flamme de combustion.

VI.2.3. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la vitesse d'écoulement dans la flamme :

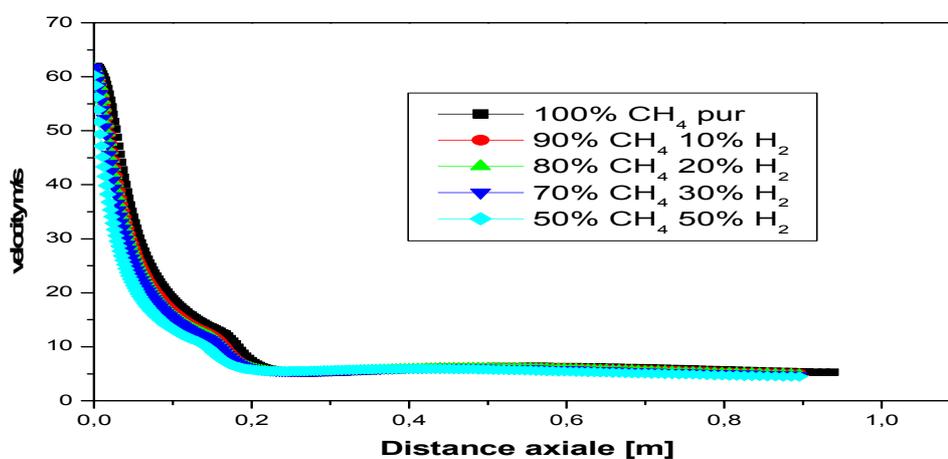


Figure. VI.3. Les profils de la vitesse pour différents pourcentages d'H₂

On remarque que l'ajout d'hydrogène diminue la vitesse d'écoulement lors de l'ajout d'hydrogène. Les vitesses convergent vers la même valeur au loin de l'axe de la flamme dans la chambre de combustion, on conclut alors que l'ajout d'hydrogène provoque une réduction de la vitesse d'écoulement dans la flamme, ce qui été déjà observé par L.Ziani et al [8].

VI.2.4.Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique de méthane et d'hydrogène.

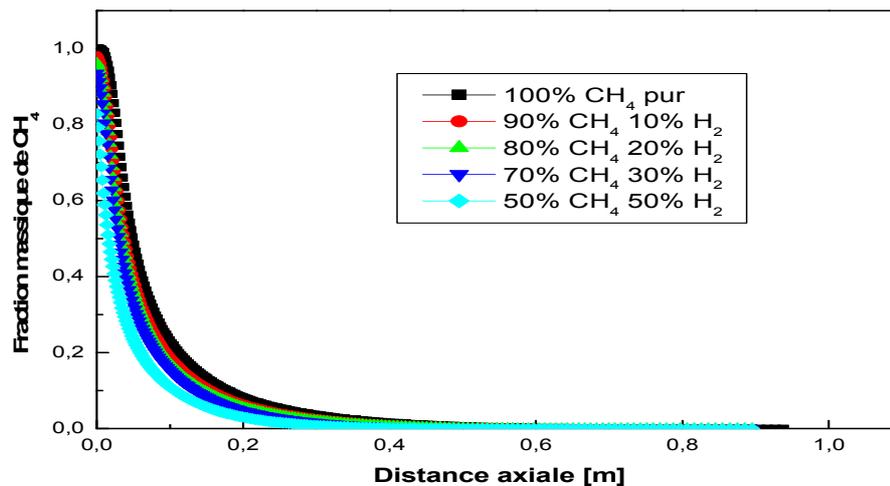


Figure. IV.4. Les fractions massiques de méthane pour les différents pourcentages d' H_2 .

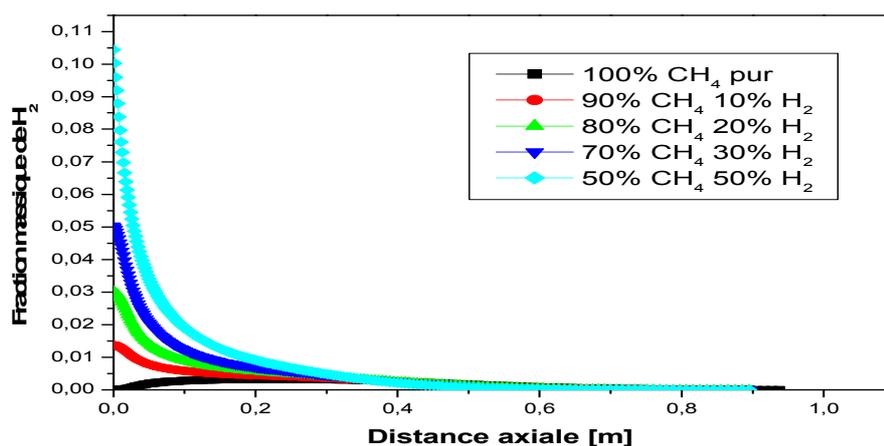


Figure. VI.5. Les fractions massiques de l'hydrogène pour les différents pourcentages d' H_2 .

On remarque que la fraction massique de méthane est réduite complètement, d'après la figure 4.

Concernant la figure 5, on remarque que l' H_2 a été trouvé en petite quantité à la proche de l'entrée de la chambre de combustion pour le cas de CH_4 pur,

La consommation totale du méthane et d'hydrogène est expliquée par la formation du l'eau et du dioxyde de carbone [33 ; 37].

VI.2.5.Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique de CO :

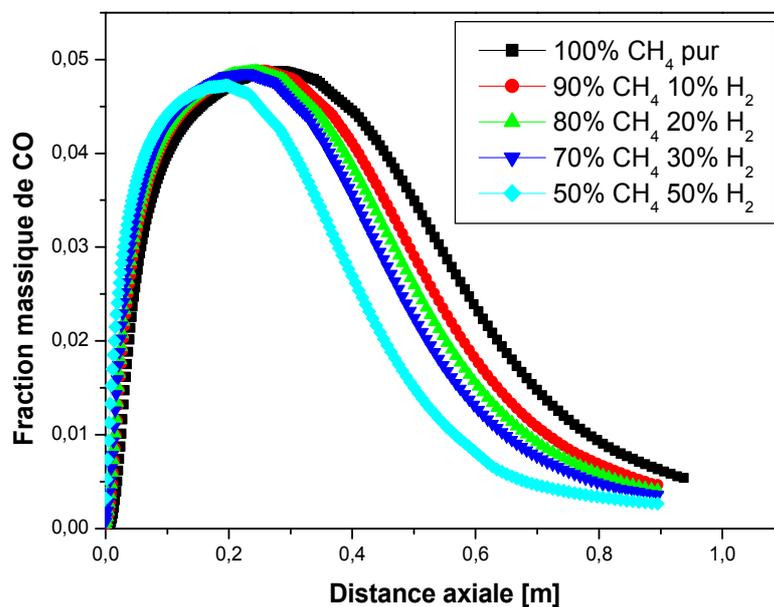


Figure.VI.6. Les fractions massiques de CO pour les différents pourcentages d' H_2

La figure 6 présente les profils de la fraction massique de CO en fonction de différents pourcentages d' H_2 , on remarque que la fraction massique de CO a initialement augmenté puis a diminué dans chaque cas.

Les résultats montrent clairement que les valeurs du CO diminuent avec l'ajout de pourcentage d'hydrogène dans le carburant et ils sont inférieurs à celles du méthane pur.

On peut noter qu'au fur et à mesure que l'augmentation d'hydrogène, le processus de combustion a évolué dans tous les cas et que la fraction massique de CO a diminué, ce qui est naturel car nous avons une réduction de la fraction massique globale du carbone lors de l'ajout d'hydrogène. Cela s'explique par le fait que le CO est un produit de combustion intermédiaire

résultant de la pyrolyse du CH_4 et se forme dans la région du réservoir où se trouve le combustible.

Les émissions de CO sont réduites avec l'ajout d' H_2 au mélange de carburant [38].

I. ziani et al [8] ont montré que l'ajout d'hydrogène entraîne une diminution de la quantité de CO produit, car le taux de carbone dans le taux de carbone global dans le mélange méthane-hydrogène est une réduction par addition d'hydrogène [8].

VI.2.6. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique de NO :

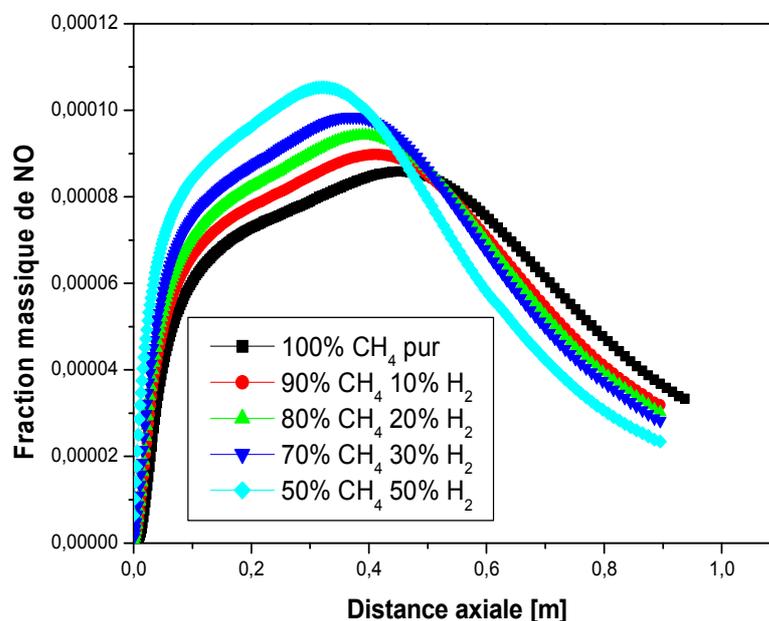


Figure.VI.7. La fraction massique de NO pour les différents pourcentages d' H_2

La figure 7 montre la distribution axiale de la fraction massique de NO pour différents les pourcentages d'hydrogène.

On remarque que l'augmentation de la fraction d'hydrogène dans le carburant provoque une augmentation de la fraction massique NO, cette formation de NO peut être attribuée à deux voies chimiques principales qui sont les mécanismes thermiques de Zel'dovich et Fenimore [39]

Comme on a déjà constaté dans la figure 2, les températures de flamme sont considérablement plus élevées avec l'addition d'hydrogène ($T = 1886 \text{ K}$ pour $50\% \text{ H}_2$) [8,40], de ce fait le

mécanisme de Zel'dovich devient plus important par rapport à celui de Fenimore, et cela lorsque la proportion d'hydrogène augmente.

VI.2.7. Effet de l'ajout d'hydrogène sur la fraction massique d'OH :

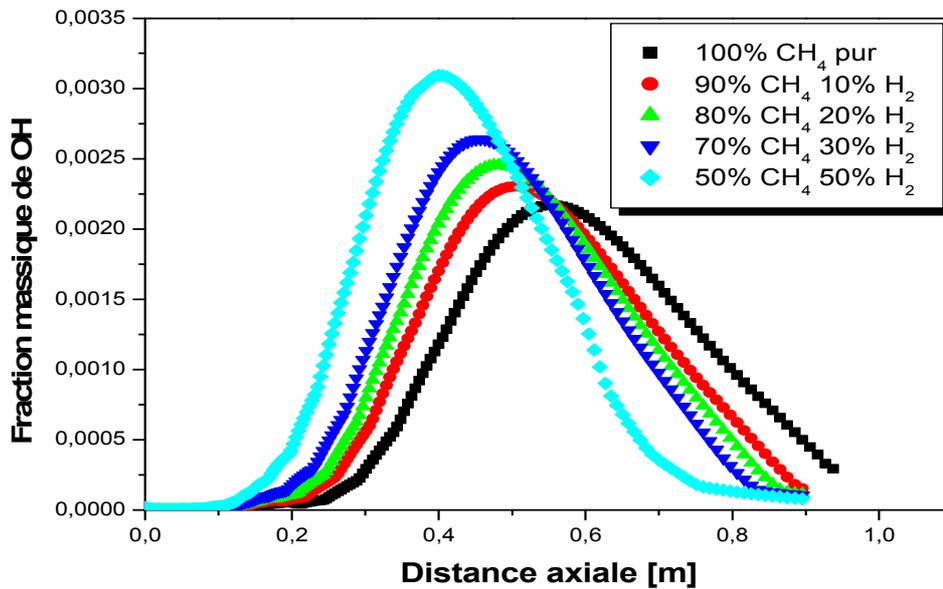


Figure VI.8. Les fractions massiques d'OH pour les différents pourcentages d'H₂

On remarque que l'augmentation de la fraction d'hydrogène dans le carburant provoque une forte augmentation de la fraction massique d'OH.

Le taux de consommation de CH₄ augmente considérablement avec l'ajout d'hydrogène, ce qui peut être attribué à l'augmentation des fractions de H, O et OH à fur et à mesure que l'hydrogène augmente [38].

Conclusion générale

Conclusion générale

L'hydrogène est un combustible propre et pouvant être obtenu par voie renouvelable (ex : biomasse ou craquage de l'eau par l'énergie solaire). Le remplacement d'un combustible par l'hydrogène est bénéfique, car ce dernier est propre mais reste dangereux et nécessite beaucoup de modifications dans les installations vu sa diffusion et son pouvoir calorifique très élevé $P_{ciH_2}=119930$ KJ/Kg $P_{ciCH_4}= 50020$ KJ/KG. Pour bénéficier à court terme de l'hydrogène, la solution est de remplacer une partie du combustible dans une combustion pauvre.

Dans ce travail il a été question d'étudier l'effet d'hydrogène sur une flamme de diffusion turbulent, le carburant utilisé dans cette flamme est un mélange de méthane et d'hydrogène qui varie entre 0% et 50%.

Les résultats de la simulation de la combustion turbulente d'hydrogène/méthane non pré-mélangé ont été obtenus à l'aide du code fluent, en utilisant le modèle de combustion PDF et de la turbulente k-ε, et le schéma cinétique GRIMEch 3.0.

Les résultats suivants ont été obtenus :

- Accélération de la réaction de combustion, et une consommation plus rapide du combustible,
- Un rétrécissement de la flamme,
- Augmentation de la température de combustion avec l'ajout d'hydrogène.
- Réduction de la production de CO,
- Augmentation de la production d'OH,
- Avec l'addition d'hydrogène, le mécanisme de Zel'dovich devient plus important par rapport à celui de Fenimore.

Par conclusion, on peut considérer que l'ajout d'hydrogène dans la combustion comme une solution intéressante pour la réduction de la production de gaz polluant inhérent à la combustion. De plus si cet hydrogène est produit avec des ressources renouvelables.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] S.R. BELL & M. GUPTA, Extension of the lean operating limit for natural gas fueling of a sparkignited engine using hydrogen blending, *Combust. Sci. & Tech.* 1997, Vol. 123, pp. 23-48.
- [2] J.L.GAUDUCHEAU et B. DENET et G. SEARBY, A numerical study of lean CH₄/H₂/Air premixed flames at high pressure, *Combust. Sci. & Tech.* 1998, Vol. 137, pp. 81-99.
- [3] F. Harouadi et S. Boulahrou Etude et Analyse de la Combustion Turbulente dans un Moteur Alimenté en Gaz Nature. *Rev. Energ. Ren.* Vol.3 (2000) 93-103.
- [4] G. S. Jackson et al, Influence of H₂ on the response of lean premixed CH₄ flames to high strained flows, *Combustion & Flame* 132 (2003) 503-511.
- [5] F. Tabet-Helal, B. Sarh et I. Gökalp Etude par simulation numérique des caractéristiques d'une flamme de diffusion turbulente avec co-courant d'air d'un mélange de CH₄ - H₂. *Revue des Energies Renouvelables* Vol. 10 N°2 (2007) 173 – 180
- [6] B. Boumeddane., Investigations numériques de l'auto inflammation des mélanges méthane/air en mode HCCI, 19ème Congrès Français de Mécanique, Marseille, 24-28 août 2009.
- [7] Abdelbaki MAMERI Etude numérique de la combustion turbulente du prémélange pauvre méthane/air enrichi à l'hydrogène ; MÉCANIQUE ET ÉNERGÉTIQUE. UNIVERSITÉ D'ORLÉANS .2009.
- [8] L.Ziani ; A.Chaker ; K.Chetehouna ; A. Malek ; B.Mahmah ; Numerical simulations of non-premixed turbulent combustion of CH₄-H₂ mixtures using the PDF approach *International Journal of Hydrogen Energy* 2013.
- [9] M. ALLICHE ; M.BOUKHELEF, A.BENAROUS ; ETUDE NUMERIQUE DE L'INFLUENCE DES CONDITIONS D'INJECTION SUR LE COMPORTEMENT D'UNE FLAMME DE DIFFUSION D'HYDROGENE. *Sciences & Technologie B – N°44*, (Décembre 2016), pp 69-74
- [10] M. ALLICHE et F.Z.KHALADI et S.Chikh ; NUMERICAL SIMULATION OF CH₄ - H₂-AIR NON-PREMIXED FLAME STABILIZED BY A BLUFF BODY. *International Conference on Materials & Energy* 2016
- [11] F.Z.Khaladi ; M. Alliche ; S. Chikh ; Numerical simulation of CH₄-H₂-AIR non-premixed flame stabilized by a bluff body. *Energy Procedia* .2017.
- [12] P. Sovanna. *Moteurs thermiques : particularités du moteur diesel*, 2004
- [13] J.Trapy. <Moteur à allumage commandé >. *Technique de L'ingénieur ; BM 2540*

Références bibliographiques

- [14] P.Duysinx. Moteurs à combustion interne ; Partie : Principes de fonctionnement & Technologie. Université de Liège Année académique 2015-2016.
- [15] A. MENAA ; Simulation Numérique de la combustion dans un moteur fonctionnant en mode dual fuel. Diplôme de MAGISTER. École militaire polytechnique .2014.
- [16] M.S. Lounici ; Contribution à la réduction de la pollution urbaine en Algérie par recours à l'utilisation de carburants alternatifs. Thèse de Doctorat. FSI Boumerdes 2011 .
- [17] https://fr.wikipedia.org/wiki/Moteur_à_hydrogène
- [18] Masood S. N. Mehdi P. Ram Redd .Experimental Investigations on a Hydrogen-Diesel Dual Fuel EngineatDifferent Compression Ratios. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power 129(2) · April 2007.
- [19] F. Amrouche, et al, Towardhydrogenenriched Natural gas “HCNG” fuel on the algerian road, International Journal of HydrogenEnergy (2010), doi:10.1016/j.ijhydene.2010.07.042
- [20]MA. EscalanteSoberanis, AM. Fernandez. A review on the technical adaptations for internal combustion engines to operatewithgas/hydrogen mixtures. International Journal of HydrogenEnergy (2009), doi:10.1016/ j.ijhydene.2009.09.070.
- [21] NASA Technical Note, May 1977, "Emissions and Total EnergyConsumption of a Multicylinder Piston Engine Running on Gasoline and a Hydrogen-Gasoline Mixture "
- [22] A. Chatterjee, S. Dutta, B.K. Mandal ; Combustion Performance and Emission Characteristics of Hydrogen as an Internal Combustion Engine Fuel. Journal of Aeronautical and Automotive Engineering (JAAE) 2014.
- [23] R. L. Hoekstra, K. Collier, N. Mulligan and L. Chew. Experimentalstudy of a clean burningvehicle fuel. Int. J. HydrogenEnergy, Vol. 20, No. 9, pp. 731 745, 1995.
- [24] Z. Huang, J.Wang, B. Liu, K. Zeng, J. Yu, and D. Jiang, Combustion Characteristics of a Direct-Injection EngineFueledwith Natural Gas-HydrogenBlendsunderVarious Injection Timings, Energy& Fuels 2006, 20, 1498-1504.
- [25] T. Ouksel *, A. Chelghoum et A. Mameri ; Etude de la combustion HCCI du GNC enrichi à l'hydrogène à l'aide de Chemkin-Pro. 2017. Revue des Energies Renouvelables Vol. 20 N°3
- [26] Z. Huang ; J.Wang ; E. Hu ; Ch. Tang ; Y. Zhang. Progress in hydrogen enriched hydrocarbons combustion and engine applications. Frontiers in EnergyMarch 2014.
- [27] F.Halter. Caractérisation des effets de l'ajout d'hydrogène et de la haute pression dans les flammes turbulentes de prémélange méthane/air. Energie électrique. Université d'Orléans, 2005. Français

Références bibliographiques

- [28] Y. Moule. Modélisation et Simulation de la Combustion dans les Écoulements Rapides. Applications aux Superstatoréacteurs. Autre. Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2013
- [29] K. K. KUO. « Principales of Combustion ». Ed. John Wiley. New York, (1986).
- [30] A. FILALI « Étude de l'aérodynamique sans et avec réaction chimique dans une chambre de combustion comportant un élargissement et un rétrécissement Brusque » thèse de magistère, en génie mécanique option Energétique Appliquée en engineering. 2010.
- [31] R.BORGHI & M. DESTERIAU La combustion et les flammes, TECHNIP (1975).
- [32] K.Quonc ;N.Khan ;.Contribution à la modélisation et à la simulation numérique de la combustion turbulente pré-mélangée dans des régimes d'interaction chimie-turbulence extrêmes: Prise en compte des écarts à l'hypothèse de flamme mince. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2016.
- [33] A. MAMERI, I. GÖKALP et D. BOUKEFFA ; Simulation Numérique de la Stabilisation d'une Flamme Turbulente de Méthane en Régime Pauvre Par Ajout d'Hydrogène. 2WIH2/ 27-29 Octobre 2007 – Ghardaïa Algérie
- [34] GAMBIT 2.0 Documentation : User's guide. Modelling guide. Tutorial guide. Fluent. Inc.2001.
- [35] M. H. Attia, A. Khechekhouche and Z.Driss ; Numerical Simulation of Methane-Hydrogen Combustion in the Air: Influence on Combustion Parameters. Indian Journal of Science and Technology 11(02) · February 2018.
- [36] P. Kumar, D.P. Mishra ; Experimental investigation flaminar LPG–H₂ jet diffusion flame. International Journal of Hydrogen Energy 33 (2008) 225–231.
- [37] T. Ouksel, A. Chelghoum et A. Mameri ; Etude de la combustion HCCI du GNC enrichi à l'hydrogène à l'aide de Chemkin-Pro. Revue des Energies Renouvelables Vol. 20 N°3 (2017) 423 - 431
- [38] J.Wang, Z.Huang, C.TangC, H.Miao, X.Wang. Numerical study of the effect of hydrogen addition on methane-air mixtures combustion. Int J HydrogEnergy 2009;34:1084e6.
- [39] M. Ilbas, I.Yilmaz ,Y.Kaplan . Investigation of hydrogen and hydrogen-hydrocarbon composite fuel combustion and NO_x emission characteristics in a model combustor. Int J Hydrogen Energy 2005;30(10):1139–47.
- [40] SR.Turns. An introduction to combustion: concepts and applications. New York, NY: McGraw-Hill, Inc.; 1996.

Annexes

1. Réalisation sur Gambit :

Dans cette étude nous allons travailler avec une géométrie de la chambre de combustion rectangulaire simple en deux démontions avec une longueur de 1000mm et 250 mm de larguer, tenant en compte que cette géométrie est axisymétrique ce qui nous permet d'étudier une seule partie de la géométrie totale.

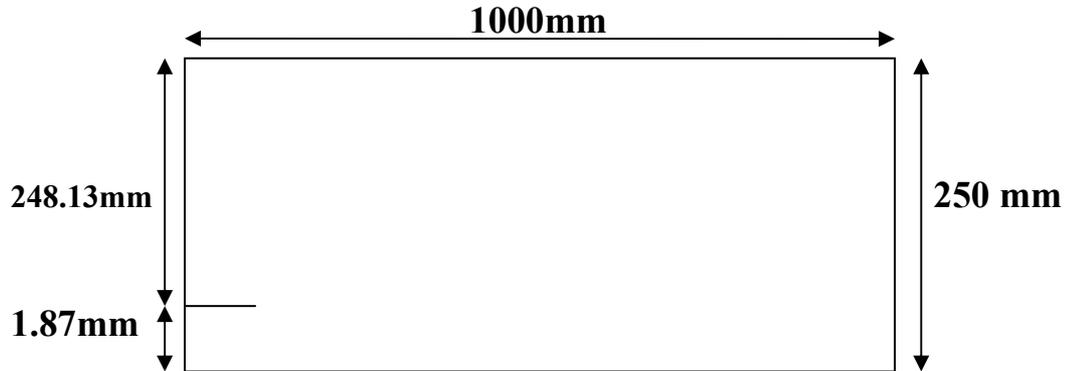


Figure.1. La géométrie de la chambre de combustion.

1.1. Construction d'un maillage :

- **La conception de la géométrie**
 - ✓ Génération des points
 - ✓ Génération des lignes
 - ✓ Génération des surfaces

- **Génération de maillage :**

La géométrie a été dessinée possible grâce au logiciel de conception de géométrie GAMBIT.

Le maillage quadratique structuré a été utilisé dans ce travail.

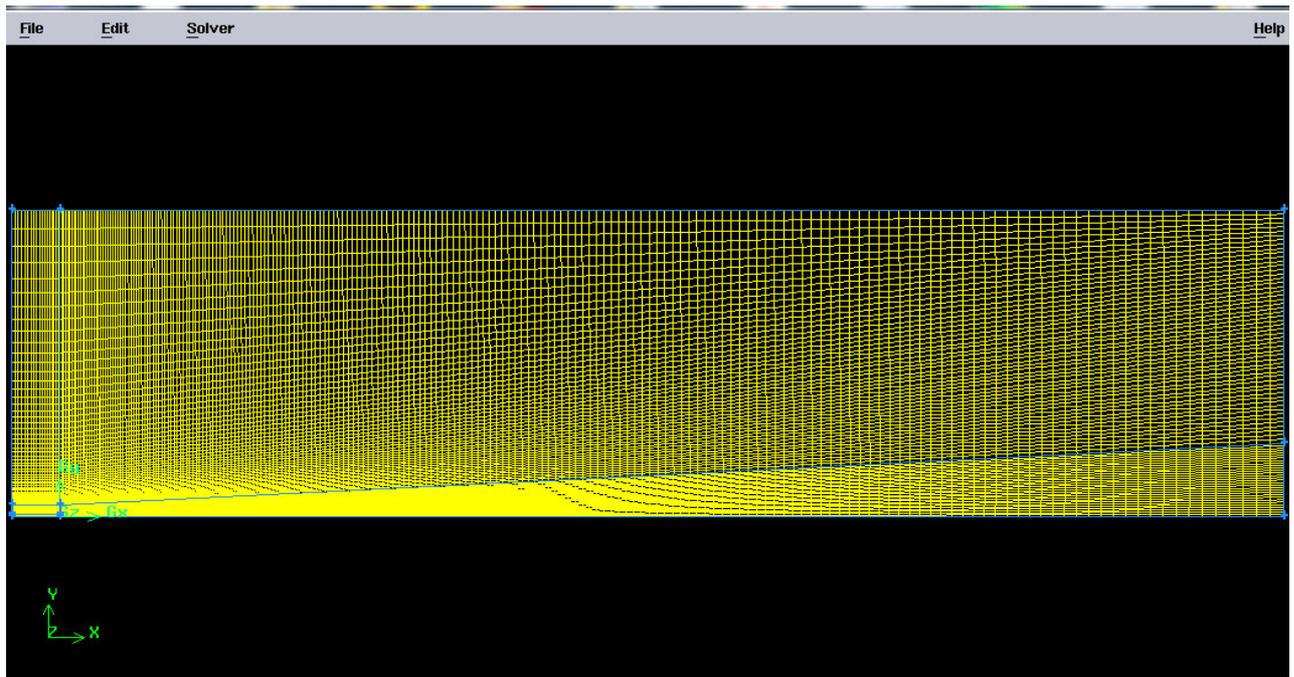


Figure.2. Aperçue du maillage utilisé.

1.2. Définition des paramètres des zones de calcul :

✓ Condition aux limites :

Les deux entrées : nous choisissons le type **velocity –inlet** ;

La sortie : nous choisissons **Pressure-outlet**;

Pour l'axe : **axis**

Et pour la paroi supérieure de la configuration on met **Symetry** ;

Paroi de jet on met **wall** ;

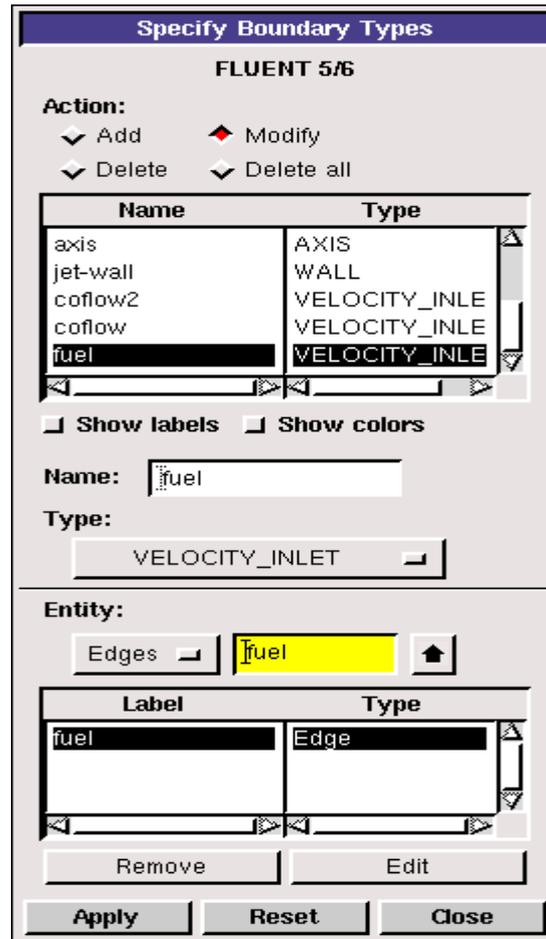


Figure.3. Condition aux limites.

✓ Définition des domaines

Dans cette partie nous allons définir la nature de chaque bord (soit fluide ou solide). Pour les deux entrées et l'axe on met fluide.

✓ Définition du maillage de gambit :

Une fois que la géométrie a été créée et que les conditions aux limites ont été définies, il faut exporter le maillage, en point .msh (mesh= maillage en anglais) pour que le Fluent soit capable de le lire et de l'utiliser. Nous pouvons ensuite fermer Gambit en sauvegardant la session (si nous souhaitons l'ouvrir) et lancer Fluent.

2. Réalisation sur FLUENT :

Puisque la géométrie en 2D nous choisissons le terme 2D comme suit :

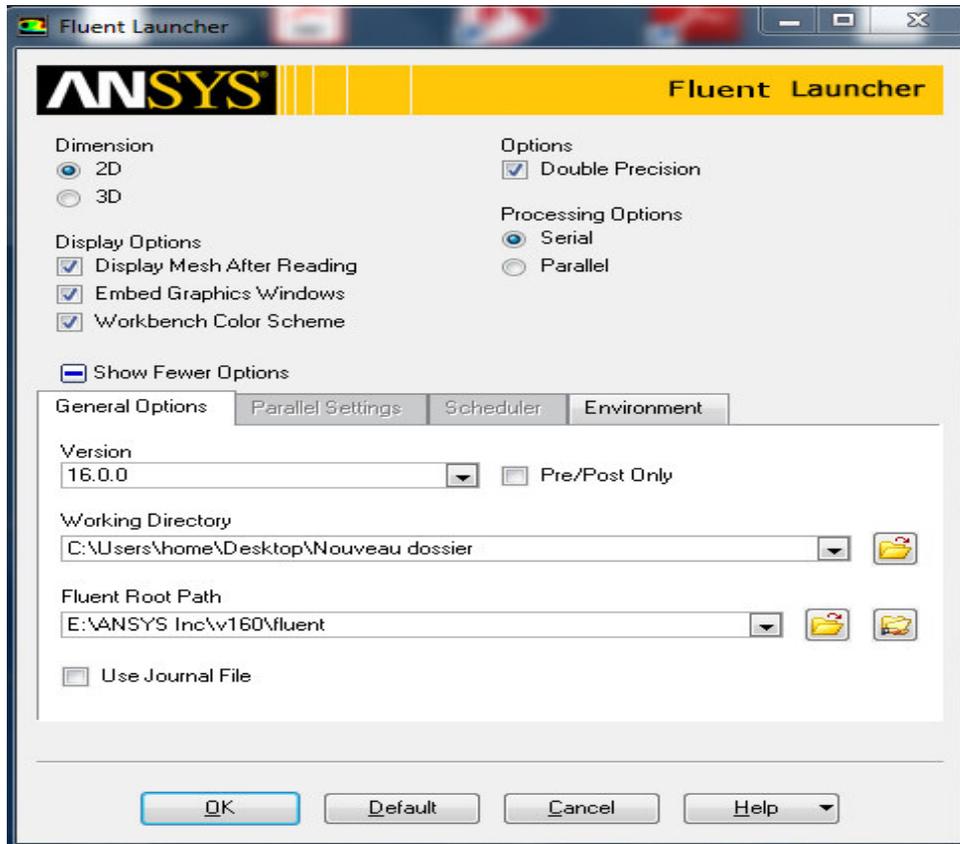


Figure.4. Choix de dimension.

Pour commencer la simulation il faut importer le fichier (*.msh) généré sous Gambit.

File → Read → Case.....

```
200 2D symmetry faces, zone 7, binary.  
18 2D symmetry faces, zone 8, binary.  
55 2D pressure-outlet faces, zone 9, binary.  
30 2D pressure-outlet faces, zone 10, binary.  
200 2D interior faces, zone 11, binary.  
55 2D interior faces, zone 12, binary.  
18 2D interior faces, zone 13, binary.  
24 2D interior faces, zone 14, binary.  
6 2D interior faces, zone 15, binary.  
200 2D axis faces, zone 16, binary.  
18 2D axis faces, zone 17, binary.  
18 2D wall faces, zone 18, binary.  
18 2D wall faces, zone 27, binary.  
55 2D velocity-inlet faces, zone 19, binary.
```

Annexes

```
Cleanup script file is C:\Users\home\Desktop\Nouveau dossier\cleanup-fluent-khalida-4
> Reading "C:\Users\home\Desktop\Nouveau dossier\CH4 pur.cas"...
  6000 quadrilateral cells, zone 2, binary.
 11000 quadrilateral cells, zone 3, binary.
   990 quadrilateral cells, zone 4, binary.
   432 quadrilateral cells, zone 5, binary.
   108 quadrilateral cells, zone 6, binary.
   192 2D interior faces, zone 25, binary.
   822 2D interior faces, zone 24, binary.
  1907 2D interior faces, zone 22, binary.
 21745 2D interior faces, zone 1, binary.

Building...
  mesh
  materials,
  interface,
  domains,
  mixture
  zones,
  default-interior:025
  default-interior:024
  default-interior:022
  default-interior:001
  default-interior
  fuel

  coflow
  coflow2
  jet-wall
  axis
  axis2
  internal-1
  internal-2
  internal-3
  internal-4
  internal-5
  outlet
  outlet2
  wall
  wall2

  jet-wall-shadow
  fluid-1
  fluid-2
  fluid-3
  fluid-4
  fluid-5

Opening E:\ANSYSI~1\160\fluent\fluent16.0.0\KINetics\win64\kinetics_usr.dll
Opening E:\ANSYSI~1\160\fluent\fluent16.0.0\KINetics\win64\KINetics.dll
NOTE: Run speed may improve if you re-import CHEMKIN Mechanism

Done.

Preparing mesh for display...
```

✓ Vérification du maillage importé :

Mesh→ check

Ceci permet de vérifier si le maillage importé ne contient pas d'erreurs ou de volumes négatifs.

```
Domain Extents:  
x-coordinate: min (m) = -3.750000e-02, max (m) = 9.375001e-01  
y-coordinate: min (m) = 0.000000e+00, max (m) = 2.500000e-01  
Volume statistics:  
minimum volume (m3): 9.632046e-10  
maximum volume (m3): 8.892696e-05  
total volume (m3): 1.914408e-01  
minimum 2d volume (m3): 3.000002e-07  
maximum 2d volume (m3): 5.759378e-05  
Face area statistics:  
minimum face area (m2): 2.000000e-04  
maximum face area (m2): 1.521814e-02  
Checking mesh.....  
Done.
```

Figure.5. Vérification du maillage sous Fluent.

✓ Vérification de l'échelle :

Mesh → Scale

Il faut toujours vérifier que les dimensions affichées correspondent aux dimensions physiques du problème :

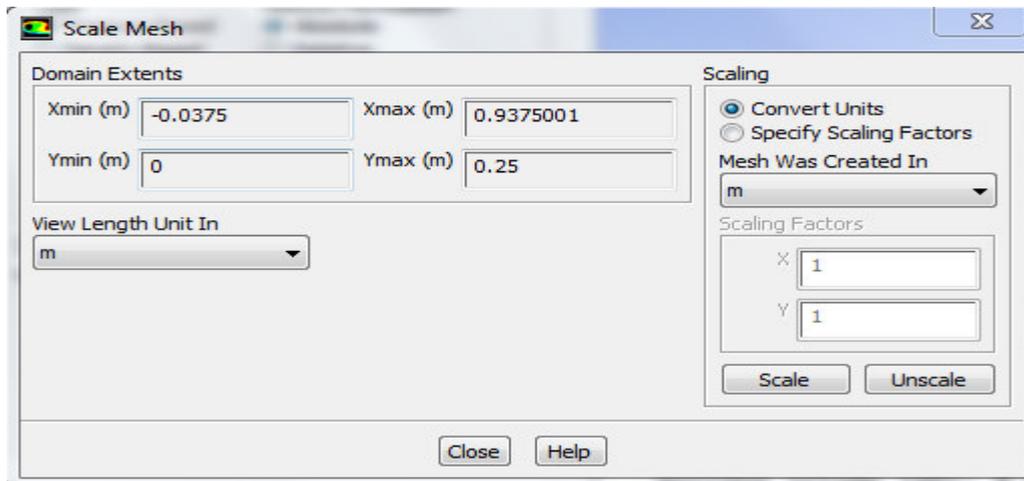


Figure.6. Vérification de l'échelle.

✓ Choix du solveur :

Define → Général → Solver.....

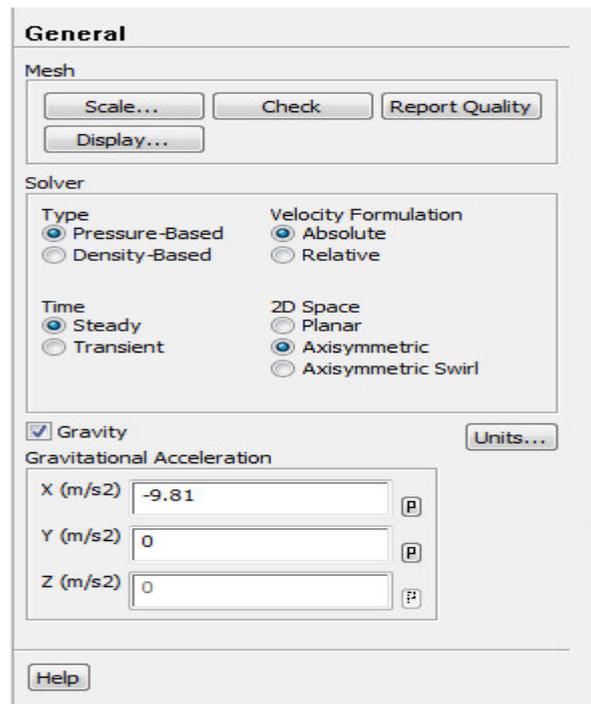


Figure.7. Choix de solveur sous Fluent.

✓ Affichage de la grille :

Display → Mesh

Nous pouvons afficher le maillage et il est très judicieux de vérifier les conditions aux limites définies au préalable dans Gambit.

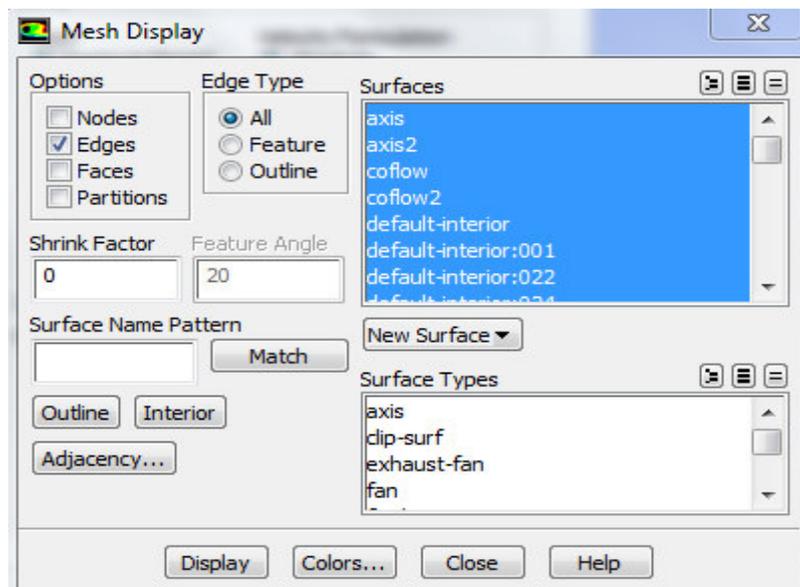


Figure.8 .Vérification des conditions aux limites.

Nous pouvons aussi voir le maillage sous fluent.

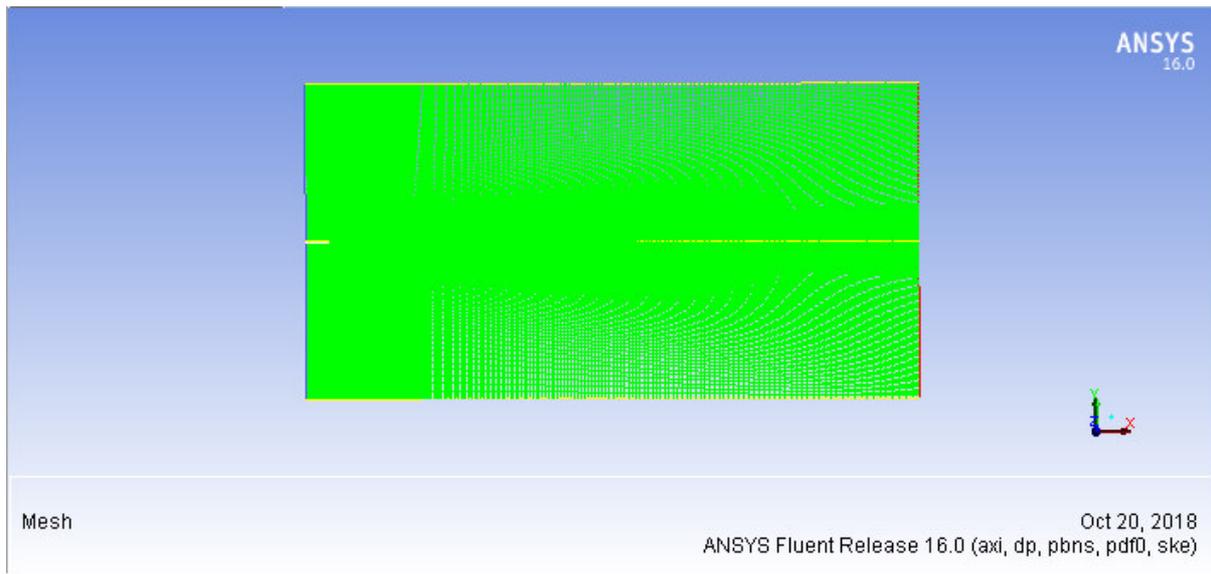


Figure.9. Affichage de la grille et vérification des conditions.

✓ Etablissement de l'équation d'énergie :

On suit les étapes suivantes :

Define→Models→energy

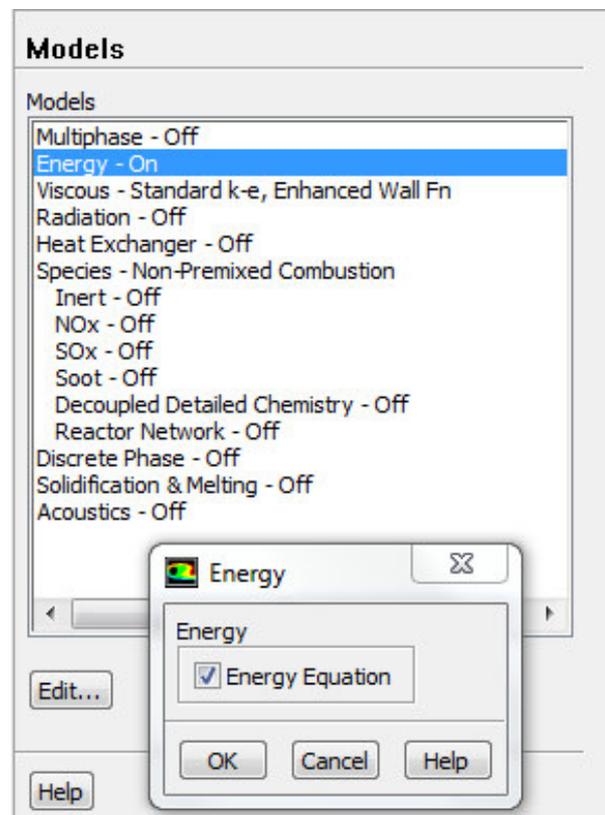


Figure.10. Etablissement de l'équation d'énergie.

✓ Choix du modèle de turbulence :

Define→Modèles→Viscous

Fluent propose différentes modalisations de l'écoulement turbulent. Parmi lesquels les écoulements non visqueux ; laminaires ; turbulents... Etc.

Dans notre cas le modèle idéal pour cette étude, est le k- ϵ modifié, donc nous le choisissons et modifions les constantes C1 et C2.

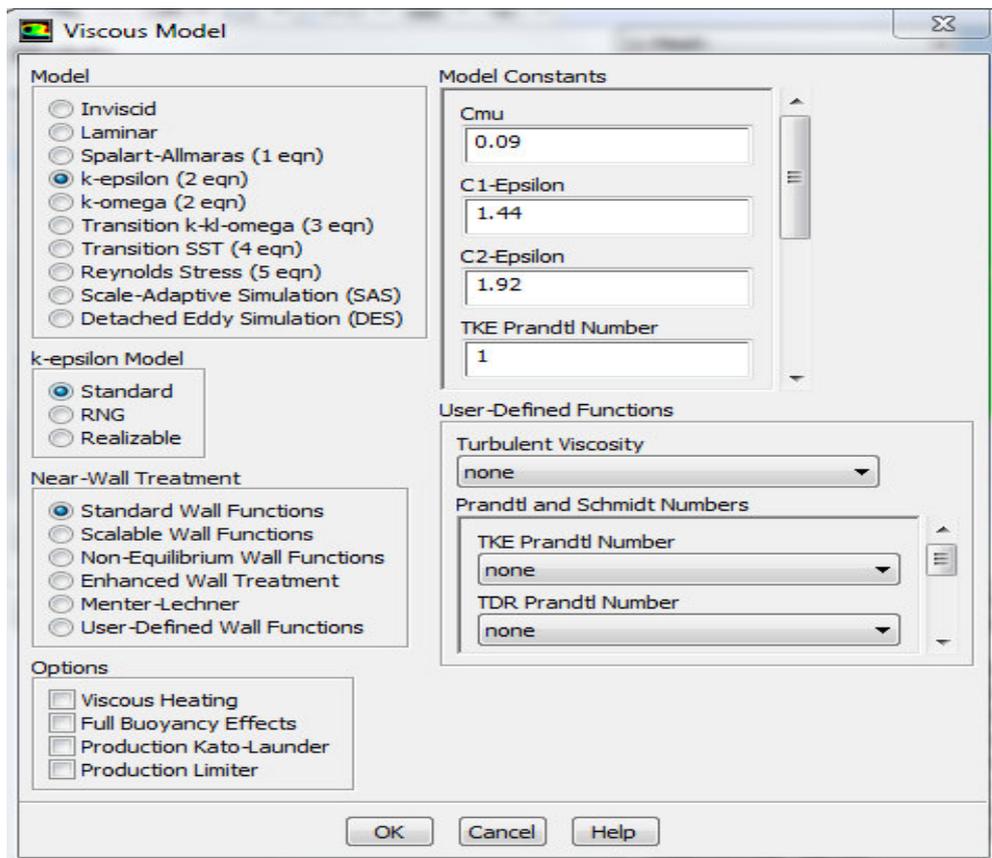


Figure.11. Choix du modèle de turbulence.

✓ Définition des caractéristiques des espaces chimiques :

Dans cette étape, nous introduisons le mécanisme chimique en important des données à partir de schéma cinétique GRI.03 qui contient les caractéristiques des espèces et toutes les réactions avec lesquelles se compose le mécanisme réactionnel dans notre cas nous suivons les étapes suivantes :

File →import→ CHEMKIN Mechanism

Annexes

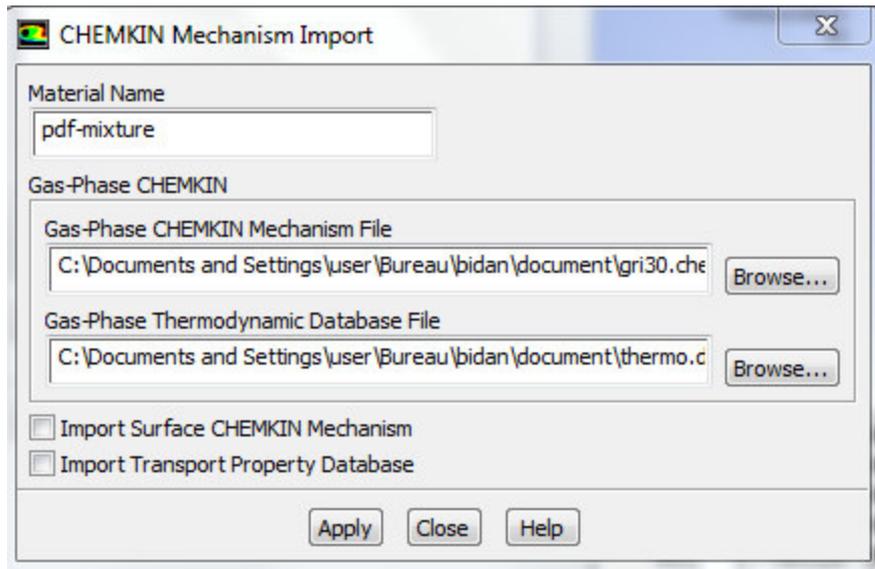


Figure.12. Importation des données chimique.

Maintenant nous retournons au menu **Modèles** pour définir les caractères des espèces chimiques donc nous allons activer le modèle **Non-premixed combustion**, nous choisissons comme modèle de combustion turbulence le modèle **PDF** les options **Inlet Diffusion** et energy treatment **Non-adiabatic**, et state relation **Steady Diffusion Flamelet**.

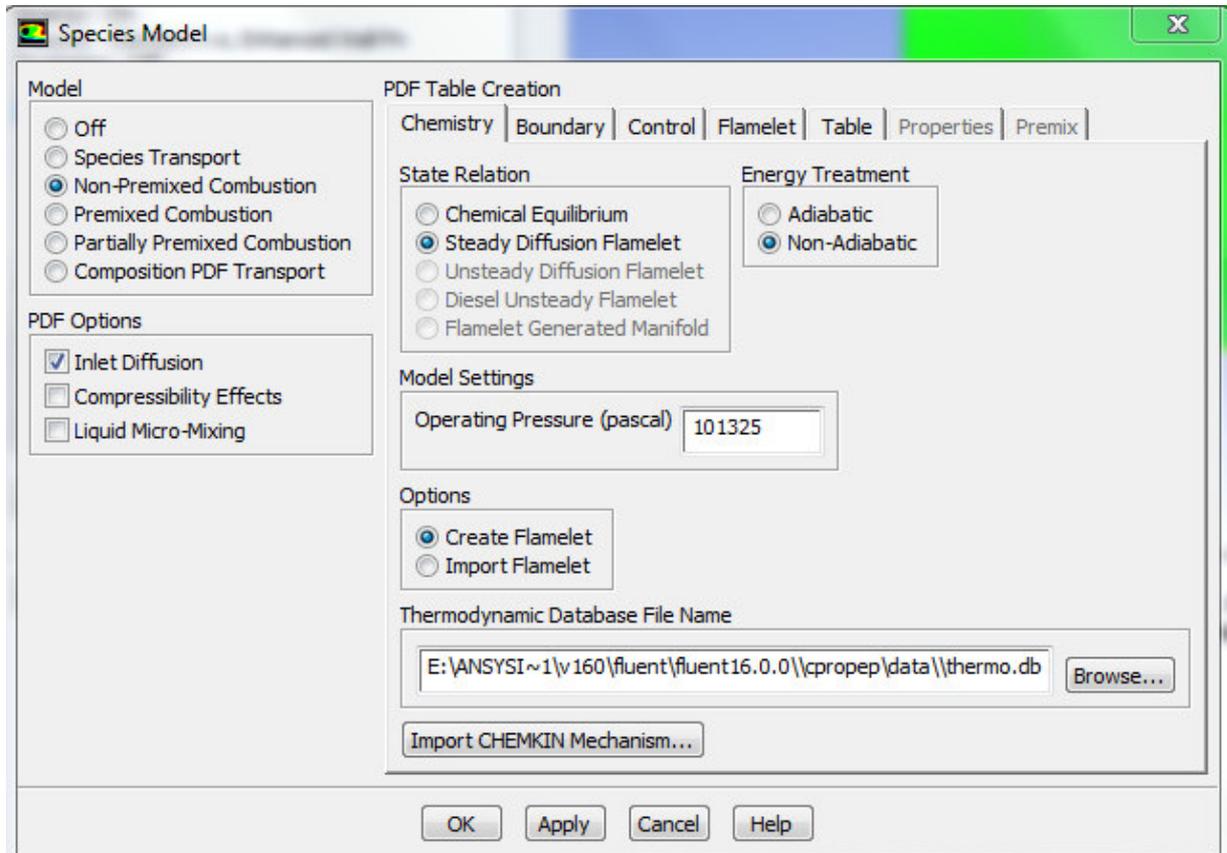


Figure.13. Définition des paramètres des espèces chimique.

Annexes

✓ Condition d'opération :

Define → Operating condition

Avant de choisir les conditions aux limites il faut choisir d'abord la valeur de la pression et de température de référence operating condition.

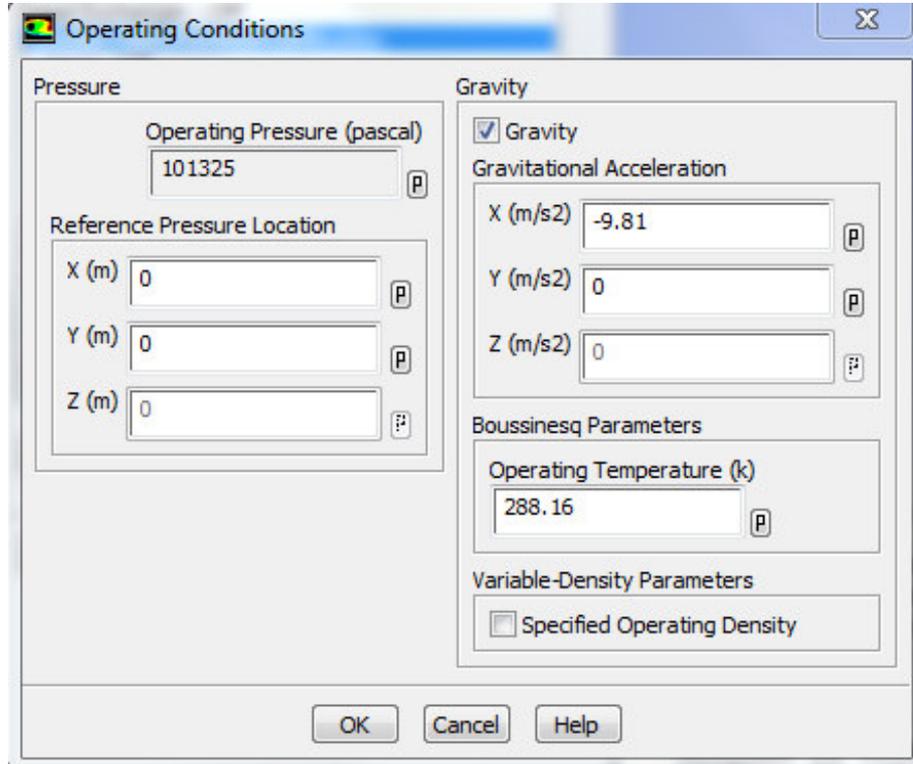


Figure.14. Choix de la pression et température de référence.

✓ Condition aux limites usuelles :

Define → Boundary Condition

Ensuite il faut fixer les valeurs des conditions aux limites dans notre cas nous avons cinq zones de calcul (Fuel, coflow, outelet, wall et axis)

Nous prenons par exemple la zone Fuel, nous mettons le terme Velocity-inlet, il est utilisé quand la vitesse d'entrée est connue comme la zone Fuel donc l'activation comme suite.

Define → boundary Condition → Velocity

Après nous allons définir les propriétés suivantes.

Paramètre Momentun la vitesse d'entrée de Fuel $v = 50\text{m/s}$ et nous allons choisir le modèle de turbulence (k- ϵ) comme dans la figure suivante :

Annexes

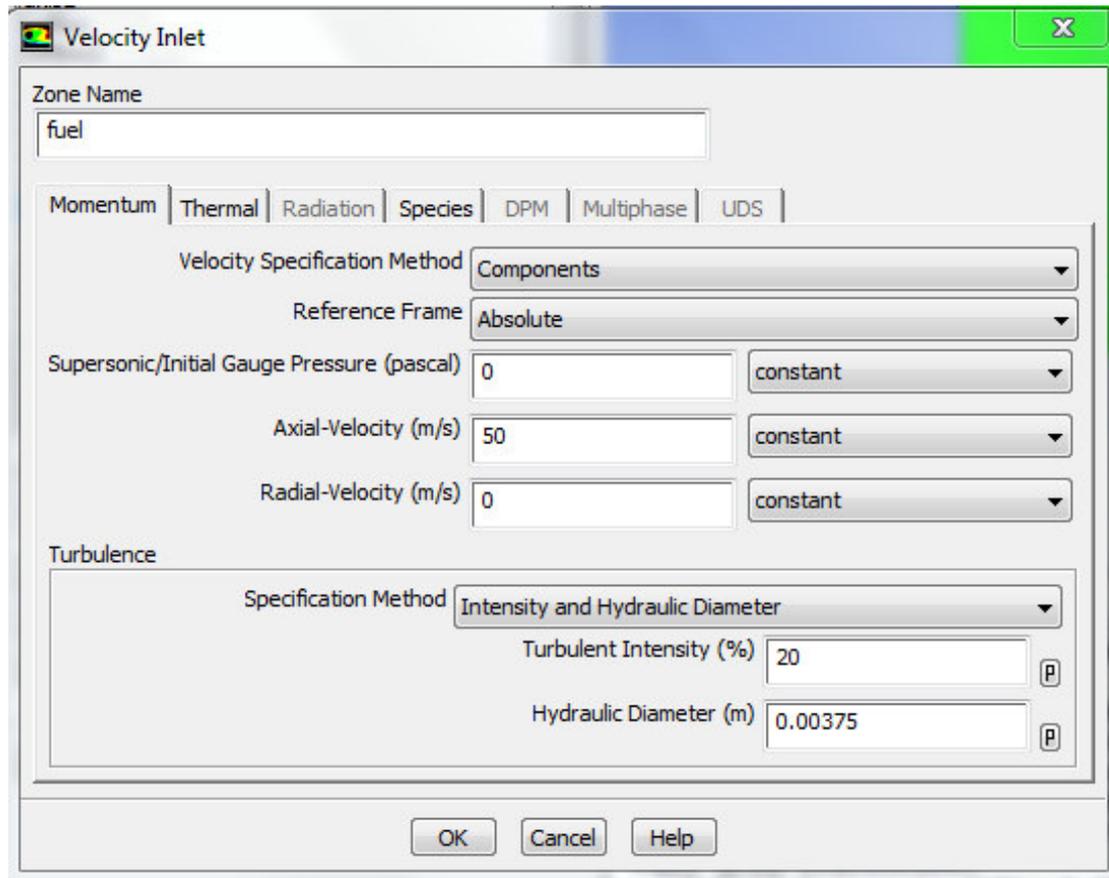


Figure.15. Paramètre momentun.

Ensuite, Thermal, pour déterminer la valeur de température d'entrée dans la Fuel $T = 300(k)$.

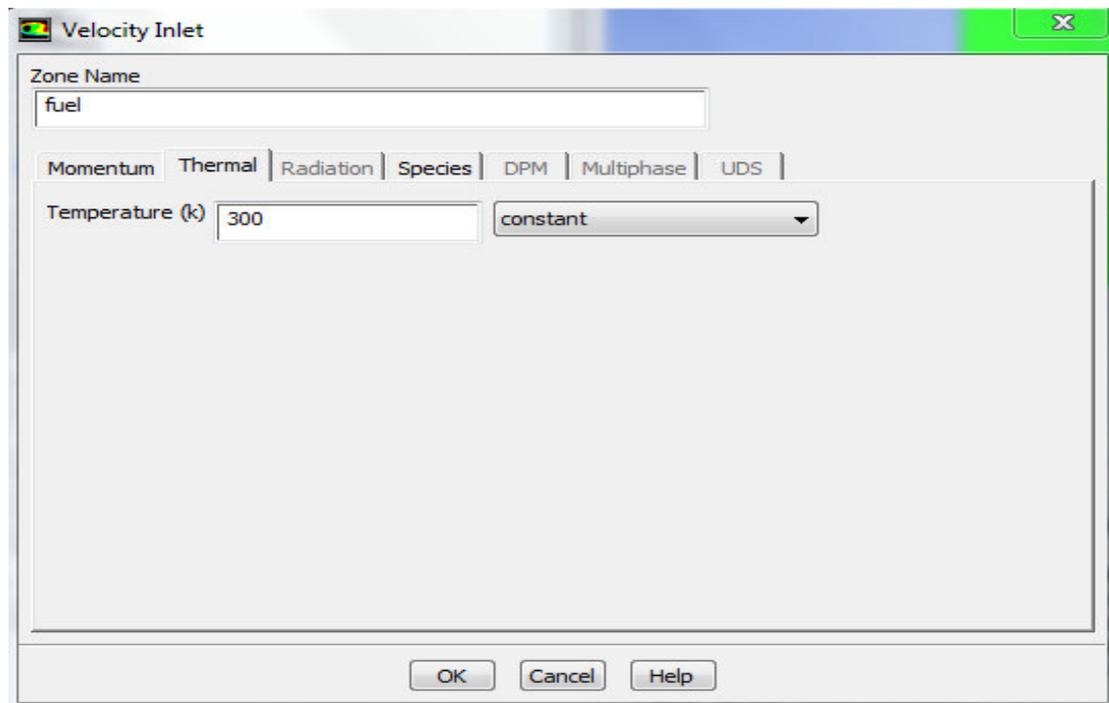


Figure.16. Entrer la valeur de la température.

Annexes

Maintenant nous allons saisir les valeurs des concentrations des espèces.

Par exemple dans le Fuel (CH_4+H_2) on utilise plusieurs étapes pour chaque concentration comme 10% H_2 et 90 % CH_4 comme espèces chimiques.

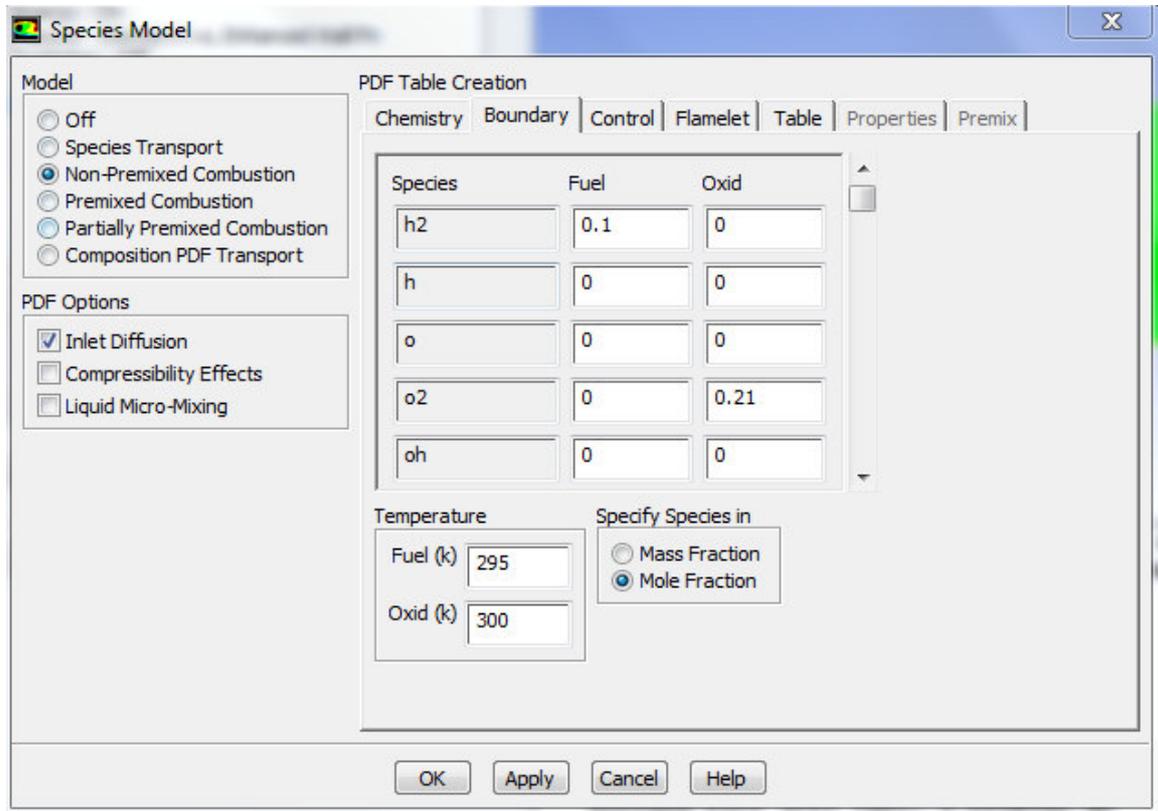


Figure.17. Entrer les concentrations des espèces chimiques.

Maintenant nous avons fixé les conditions aux limites pour Fuel, on va refaire les mêmes étapes pour les autres zones, quand on termine la fixation des conditions aux limites pour chaque autre zone on passe à l'étape de lancement de calcul.

✓ Lancement du calcul :

Solve → Run Calculation

Avant de commencer le calcul il faut d'abord choisir le nombre des itérations.

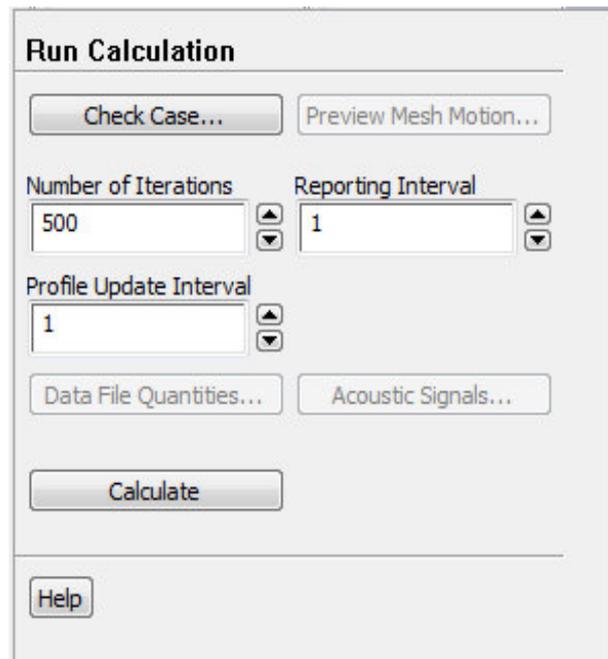


Figure.19. Choix du nombre des itérations.

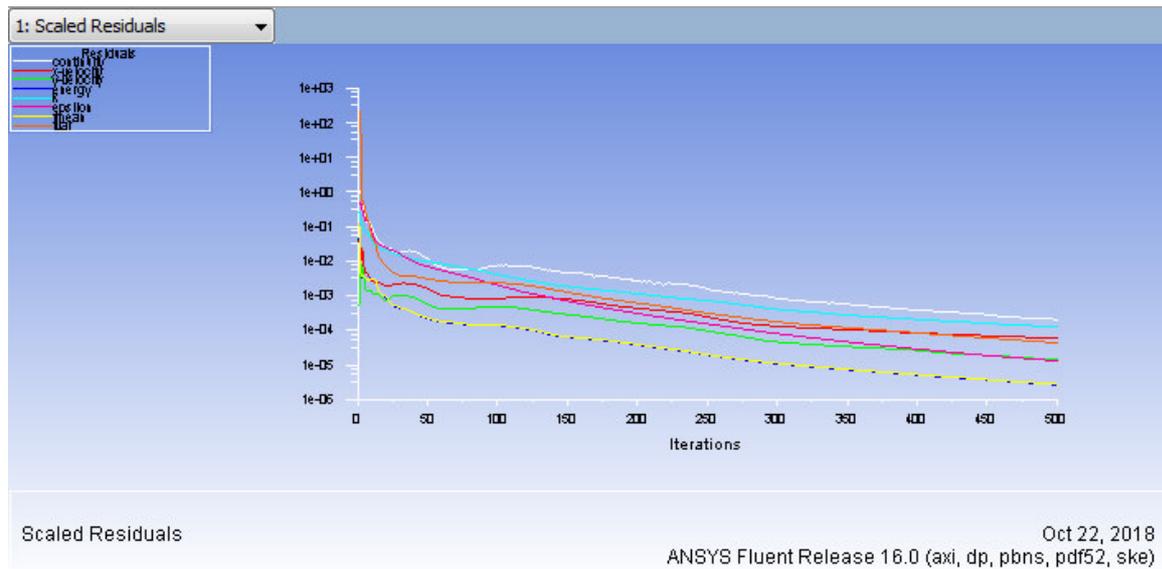


Figure.20. Allures de l'évolution des résidus de calcul.

Annexes

✓ Mécanisme réactionnel GRI 3.0

Le mécanisme réactionnel GRI 3.0, est le schéma cinétique détaillé développé par des équipes de l'université de Berkeley.

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

GRI 3.0

ELEMENTS

O H C N AR

END

SPECIES

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

END

! THERMO

! Insert GRI-Mechthermodynamics here or use in default file

! END

REACTIONS

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

Annexes

O+CH3OH<=>OH+CH3O	1.300E+05	2.500	5000.00
O+C2H<=>CH+CO	5.000E+13	.000	.00
O+C2H2<=>H+HCCO	1.350E+07	2.000	1900.00
O+C2H2<=>OH+C2H	4.600E+19	-1.410	28950.00
O+C2H2<=>CO+CH2	6.940E+06	2.000	1900.00
O+C2H3<=>H+CH2CO	3.000E+13	.000	.00
O+C2H4<=>CH3+HCO	1.250E+07	1.830	220.00
O+C2H5<=>CH3+CH2O	2.240E+13	.000	.00
O+C2H6<=>OH+C2H5	8.980E+07	1.920	5690.00
O+HCCO<=>H+2CO	1.000E+14	.000	.00
O+CH2CO<=>OH+HCCO	1.000E+13	.000	8000.00
O+CH2CO<=>CH2+CO2	1.750E+12	.000	1350.00
O2+CO<=>O+CO2	2.500E+12	.000	47800.00
O2+CH2O<=>HO2+HCO	1.000E+14	.000	40000.00
H+O2+M<=>HO2+M	2.800E+18	-.860	.00
O2/ .00/ H2O/ .00/ CO/ .75/ CO2/1.50/ C2H6/1.50/ N2/ .00/ AR/ .00/			
H+2O2<=>HO2+O2	2.080E+19	-1.240	.00
H+O2+H2O<=>HO2+H2O	11.26E+18	-.760	.00
H+O2+N2<=>HO2+N2	2.600E+19	-1.240	.00
H+O2+AR<=>HO2+AR	7.000E+17	-.800	.00
H+O2<=>O+OH	2.650E+16	-.6707	17041.00
2H+M<=>H2+M	1.000E+18	-1.000	.00
H2/ .00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO2/ .00/ C2H6/3.00/ AR/ .63/			
2H+H2<=>2H2	9.000E+16	-.600	.00
2H+H2O<=>H2+H2O	6.000E+19	-1.250	.00
2H+CO2<=>H2+CO2	5.500E+20	-2.000	.00
H+OH+M<=>H2O+M	2.200E+22	-2.000	.00
H2/ .73/ H2O/3.65/ CH4/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .38/			
H+HO2<=>O+H2O	3.970E+12	.000	671.00
H+HO2<=>O2+H2	4.480E+13	.000	1068.00
H+HO2<=>2OH	0.840E+14	.000	635.00
H+H2O2<=>HO2+H2	1.210E+07	2.000	5200.00
H+H2O2<=>OH+H2O	1.000E+13	.000	3600.00
H+CH<=>C+H2	1.650E+14	.000	.00
H+CH2 (+M) <=>CH3 (+M)	6.000E+14	.000	.00
LOW / 1.040E+26 -2.760 1600.00/			
TROE/ .5620 91.00 5836.00 8552.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH2(S) <=>CH+H2	3.000E+13	.000	.00
H+CH3 (+M) <=>CH4 (+M)	13.90E+15	-.534	536.00
LOW / 2.620E+33 -4.760 2440.00/			
TROE/ .7830 74.00 2941.00 6964.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/3.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+CH4<=>CH3+H2	6.600E+08	1.620	10840.00
H+HCO (+M) <=>CH2O (+M)	1.090E+12	.480	-260.00
LOW / 2.470E+24 -2.570 425.00/			
TROE/ .7824 271.00 2755.00 6570.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H+HCO<=>H2+CO	7.340E+13	.000	.00
H+CH2O (+M) <=>CH2OH (+M)	5.400E+11	.454	3600.00

Annexes

LOW / 1.270E+32 -4.820 6530.00/
TROE/ .7187 103.00 1291.00 4160.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH2O (+M) <=>CH3O (+M) 5.400E+11 .454 2600.00

LOW / 2.200E+30 -4.800 5560.00/
TROE/ .7580 94.00 1555.00 4200.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH2O<=>HCO+H2 5.740E+07 1.900 2742.00
H+CH2OH (+M) <=>CH3OH (+M) 1.055E+12 .500 86.00

LOW / 4.360E+31 -4.650 5080.00/
TROE/ .600 100.00 90000.0 10000.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH2OH<=>H2+CH2O 2.000E+13 .000 .00
H+CH2OH<=>OH+CH3 1.650E+11 .650 -284.00
H+CH2OH<=>CH2(S) +H2O 3.280E+13 -.090 610.00
H+CH3O (+M) <=>CH3OH (+M) 2.430E+12 .515 50.00

LOW / 4.660E+41 -7.440 14080.0/
TROE/ .700 100.00 90000.0 10000.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/
H+CH3O<=>H+CH2OH 4.150E+07 1.630 1924.00
H+CH3O<=>H2+CH2O 2.000E+13 .000 .00
H+CH3O<=>OH+CH3 1.500E+12 .500 -110.00
H+CH3O<=>CH2(S) +H2O 2.620E+14 -.230 1070.00
H+CH3OH<=>CH2OH+H2 1.700E+07 2.100 4870.00
H+CH3OH<=>CH3O+H2 4.200E+06 2.100 4870.00
H+C2H (+M) <=>C2H2 (+M) 1.000E+17 -1.000 .00

LOW / 3.750E+33 -4.800 1900.00/
TROE/ .6464 132.00 1315.00 5566.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H2 (+M) <=>C2H3 (+M) 5.600E+12 .000 2400.00

LOW / 3.800E+40 -7.270 7220.00/
TROE/ .7507 98.50 1302.00 4167.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H3 (+M) <=>C2H4 (+M) 6.080E+12 .270 280.00

LOW / 1.400E+30 -3.860 3320.00/
TROE/ .7820 207.50 2663.00 6095.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H3<=>H2+C2H2 3.000E+13 .000 .00
H+C2H4 (+M) <=>C2H5 (+M) 0.540E+12 .454 1820.00

LOW / 0.600E+42 -7.620 6970.00/
TROE/ .9753 210.00984.00 4374.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H4<=>C2H3+H2 1.325E+06 2.530 12240.00
H+C2H5 (+M) <=>C2H6 (+M) 5.210E+17 -.990 1580.00

LOW / 1.990E+41 -7.080 6685.00/
TROE/ .8422 125.00 2219.00 6882.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
H+C2H5<=>H2+C2H4 2.000E+12 .000 .00
H+C2H6<=>C2H5+H2 1.150E+08 1.900 7530.00
H+HCCO<=>CH2(S) +CO 1.000E+14 .000 .00

Annexes

H+CH ₂ CO<=>HCCO+H ₂	5.000E+13	.000	8000.00
H+CH ₂ CO<=>CH ₃ +CO	1.130E+13	.000	3428.00
H+HCCOH<=>H+CH ₂ CO	1.000E+13	.000	.00
H ₂ +CO (+M) <=>CH ₂ O (+M)	4.300E+07	1.500	79600.00
LOW / 5.070E+27 -3.420 84350.00/			
TROE/ .9320 197.00 1540.00 10300.00 /			
H ₂ /2.00/ H ₂ O/6.00/ CH ₄ /2.00/ CO/1.50/ CO ₂ /2.00/ C ₂ H ₆ /3.00/ AR/ .70/			
OH+H ₂ <=>H+H ₂ O	2.160E+08	1.510	3430.00
2OH (+M) <=>H ₂ O ₂ (+M)	7.400E+13	-.370	.00
LOW / 2.300E+18 -.900 -1700.00/			
TROE/ .7346 94.00 1756.00 5182.00 /			
H ₂ /2.00/ H ₂ O/6.00/ CH ₄ /2.00/ CO/1.50/ CO ₂ /2.00/ C ₂ H ₆ /3.00/ AR/ .70/			
2OH<=>O+H ₂ O	3.570E+04	2.400	-2110.00
OH+HO ₂ <=>O ₂ +H ₂ O	1.450E+13	.000	-500.00
DUPLICATE			
OH+H ₂ O ₂ <=>HO ₂ +H ₂ O	2.000E+12	.000	427.00
DUPLICATE			
OH+H ₂ O ₂ <=>HO ₂ +H ₂ O	1.700E+18	.000	29410.00
DUPLICATE			
OH+C<=>H+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH<=>H+HCO	3.000E+13	.000	.00
OH+CH ₂ <=>H+CH ₂ O	2.000E+13	.000	.00
OH+CH ₂ <=>CH+H ₂ O	1.130E+07	2.000	3000.00
OH+CH ₂ (S) <=>H+CH ₂ O	3.000E+13	.000	.00
OH+CH ₃ (+M) <=>CH ₃ OH (+M)	2.790E+18	-1.430	1330.00
LOW / 4.000E+36 -5.920 3140.00/			
TROE/ .4120 195.0 5900.00 6394.00/			
H ₂ /2.00/ H ₂ O/6.00/ CH ₄ /2.00/ CO/1.50/ CO ₂ /2.00/ C ₂ H ₆ /3.00/			
OH+CH ₃ <=>CH ₂ +H ₂ O	5.600E+07	1.600	5420.00
OH+CH ₃ <=>CH ₂ (S)+H ₂ O	6.440E+17	-1.340	1417.00
OH+CH ₄ <=>CH ₃ +H ₂ O	1.000E+08	1.600	3120.00
OH+CO<=>H+CO ₂	4.760E+07	1.228	70.00
OH+HCO<=>H ₂ O+CO	5.000E+13	.000	.00
OH+CH ₂ O<=>HCO+H ₂ O	3.430E+09	1.180	-447.00
OH+CH ₂ OH<=>H ₂ O+CH ₂ O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH ₃ O<=>H ₂ O+CH ₂ O	5.000E+12	.000	.00
OH+CH ₃ OH<=>CH ₂ OH+H ₂ O	1.440E+06	2.000	-840.00
OH+CH ₃ OH<=>CH ₃ O+H ₂ O	6.300E+06	2.000	1500.00
OH+C ₂ H<=>H+HCCO	2.000E+13	.000	.00
OH+C ₂ H ₂ <=>H+CH ₂ CO	2.180E-04	4.500	-1000.00
OH+C ₂ H ₂ <=>H+HCCOH	5.040E+05	2.300	13500.00
OH+C ₂ H ₂ <=>C ₂ H+H ₂ O	3.370E+07	2.000	14000.00
OH+C ₂ H ₂ <=>CH ₃ +CO	4.830E-04	4.000	-2000.00
OH+C ₂ H ₃ <=>H ₂ O+C ₂ H ₂	5.000E+12	.000	.00
OH+C ₂ H ₄ <=>C ₂ H ₃ +H ₂ O	3.600E+06	2.000	2500.00
OH+C ₂ H ₆ <=>C ₂ H ₅ +H ₂ O	3.540E+06	2.120	870.00
OH+CH ₂ CO<=>HCCO+H ₂ O	7.500E+12	.000	2000.00
2HO ₂ <=>O ₂ +H ₂ O ₂	1.300E+11	.000	-1630.00
DUPLICATE			
2HO ₂ <=>O ₂ +H ₂ O ₂	4.200E+14	.000	12000.00

Annexes

DUPLICATE

HO2+CH2<=>OH+CH2O	2.000E+13	.000	.00
HO2+CH3<=>O2+CH4	1.000E+12	.000	.00
HO2+CH3<=>OH+CH3O	3.780E+13	.000	.00
HO2+CO<=>OH+CO2	1.500E+14	.000	23600.00
HO2+CH2O<=>HCO+H2O2	5.600E+06	2.000	12000.00
C+O2<=>O+CO	5.800E+13	.000	576.00
C+CH2<=>H+C2H	5.000E+13	.000	.00
C+CH3<=>H+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH+O2<=>O+HCO	6.710E+13	.000	.00
CH+H2<=>H+CH2	1.080E+14	.000	3110.00
CH+H2O<=>H+CH2O	5.710E+12	.000	-755.00
CH+CH2<=>H+C2H2	4.000E+13	.000	.00
CH+CH3<=>H+C2H3	3.000E+13	.000	.00
CH+CH4<=>H+C2H4	6.000E+13	.000	.00
CH+CO (+M) <=>HCCO (+M)	5.000E+13	.000	.00
LOW / 2.690E+28	-3.740	1936.00/	
TROE/	.5757	237.00	1652.00 5069.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH+CO2<=>HCO+CO	1.900E+14	.000	15792.00
CH+CH2O<=>H+CH2CO	9.460E+13	.000	-515.00
CH+HCCO<=>CO+C2H2	5.000E+13	.000	.00
CH2+O2=>OH+H+CO	5.000E+12	.000	1500.00
CH2+H2<=>H+CH3	5.000E+05	2.000	7230.00
2CH2<=>H2+C2H2	1.600E+15	.000	11944.00
CH2+CH3<=>H+C2H4	4.000E+13	.000	.00
CH2+CH4<=>2CH3	2.460E+06	2.000	8270.00
CH2+CO (+M) <=>CH2CO (+M)	8.100E+11	.500	4510.00
LOW / 2.690E+33	-5.110	7095.00/	
TROE/	.5907	275.00	1226.00 5185.00 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+HCCO<=>C2H3+CO	3.000E+13	.000	.00
CH2(S) +N2<=>CH2+N2	1.500E+13	.000	600.00
CH2(S) +AR<=>CH2+AR	9.000E+12	.000	600.00
CH2(S) +O2<=>H+OH+CO	2.800E+13	.000	.00
CH2(S) +O2<=>CO+H2O	1.200E+13	.000	.00
CH2(S) +H2<=>CH3+H	7.000E+13	.000	.00
CH2(S) +H2O (+M) <=>CH3OH (+M)	4.820E+17	-1.160	1145.00
LOW / 1.880E+38	-6.360	5040.00/	
TROE/	.6027	208.00	3922.00 10180.0 /
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
CH2(S) +H2O<=>CH2+H2O	3.000E+13	.000	.00
CH2(S) +CH3<=>H+C2H4	1.200E+13	.000	-570.00
CH2(S) +CH4<=>2CH3	1.600E+13	.000	-570.00
CH2(S) +CO<=>CH2+CO	9.000E+12	.000	.00
CH2(S) +CO2<=>CH2+CO2	7.000E+12	.000	.00
CH2(S) +CO2<=>CO+CH2O	1.400E+13	.000	.00
CH2(S) +C2H6<=>CH3+C2H5	4.000E+13	.000	-550.00
CH3+O2<=>O+CH3O	3.560E+13	.000	30480.00
CH3+O2<=>OH+CH2O	2.310E+12	.000	20315.00

Annexes

CH3+H2O2<=>HO2+CH4	2.450E+04	2.470	5180.00
2CH3 (+M) <=> C2H6 (+M)	6.770E+16	-1.180	654.00
LOW / 3.400E+41 -7.030 2762.00/ TROE/ .6190 73.20 1180.00 9999.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
2CH3<=>H+C2H5	6.840E+12	.100	10600.00
CH3+HCO<=>CH4+CO	2.648E+13	.000	.00
CH3+CH2O<=>HCO+CH4	3.320E+03	2.810	5860.00
CH3+CH3OH<=>CH2OH+CH4	3.000E+07	1.500	9940.00
CH3+CH3OH<=>CH3O+CH4	1.000E+07	1.500	9940.00
CH3+C2H4<=>C2H3+CH4	2.270E+05	2.000	9200.00
CH3+C2H6<=>C2H5+CH4	6.140E+06	1.740	10450.00
HCO+H2O<=>H+CO+H2O	1.500E+18	-1.000	17000.00
HCO+M<=>H+CO+M	1.870E+17	-1.000	17000.00
H2/2.00/ H2O/ .00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/			
HCO+O2<=>HO2+CO	13.45E+12	.000	400.00
CH2OH+O2<=>HO2+CH2O	1.800E+13	.000	900.00
CH3O+O2<=>HO2+CH2O	4.280E-13	7.600	-3530.00
C2H+O2<=>HCO+CO	1.000E+13	.000	-755.00
C2H+H2<=>H+C2H2	5.680E+10	0.900	1993.00
C2H3+O2<=>HCO+CH2O	4.580E+16	-1.390	1015.00
C2H4(+M)<=>H2+C2H2(+M)	8.000E+12	.440	86770.00
LOW / 1.580E+51 -9.300 97800.00/ TROE/ .7345 180.00 1035.00 5417.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
C2H5+O2<=>HO2+C2H4	8.400E+11	.000	3875.00
HCCO+O2<=>OH+2CO	3.200E+12	.000	854.00
2HCCO<=>2CO+C2H2	1.000E+13	.000	.00
N+NO<=>N2+O	2.700E+13	.000	355.00
N+O2<=>NO+O	9.000E+09	1.000	6500.00
N+OH<=>NO+H	3.360E+13	.000	385.00
N2O+O<=>N2+O2	1.400E+12	.000	10810.00
N2O+O<=>2NO	2.900E+13	.000	23150.00
N2O+H<=>N2+OH	3.870E+14	.000	18880.00
N2O+OH<=>N2+HO2	2.000E+12	.000	21060.00
N2O(+M)<=>N2+O(+M)	7.910E+10	.000	56020.00
LOW / 6.370E+14 .000 56640.00/ H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .625/			
HO2+NO<=>NO2+OH	2.110E+12	.000	-480.00
NO+O+M<=>NO2+M	1.060E+20	-1.410	.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NO2+O<=>NO+O2	3.900E+12	.000	-240.00
NO2+H<=>NO+OH	1.320E+14	.000	360.00
NH+O<=>NO+H	4.000E+13	.000	.00
NH+H<=>N+H2	3.200E+13	.000	330.00
NH+OH<=>HNO+H	2.000E+13	.000	.00
NH+OH<=>N+H2O	2.000E+09	1.200	.00
NH+O2<=>HNO+O	4.610E+05	2.000	6500.00
NH+O2<=>NO+OH	1.280E+06	1.500	100.00
NH+N<=>N2+H	1.500E+13	.000	.00

Annexes

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
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NNH+O2<=>HO2+N2	5.000E+12	.000	.00
NNH+O<=>OH+N2	2.500E+13	.000	.00
NNH+O<=>NH+NO	7.000E+13	.000	.00
NNH+H<=>H2+N2	5.000E+13	.000	.00
NNH+OH<=>H2O+N2	2.000E+13	.000	.00
NNH+CH3<=>CH4+N2	2.500E+13	.000	.00
H+NO+M<=>HNO+M	4.480E+19	-1.320	740.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HNO+O<=>NO+OH	2.500E+13	.000	.00
HNO+H<=>H2+NO	9.000E+11	.720	660.00
HNO+OH<=>NO+H2O	1.300E+07	1.900	-950.00
HNO+O2<=>HO2+NO	1.000E+13	.000	13000.00
CN+O<=>CO+N	7.700E+13	.000	.00
CN+OH<=>NCO+H	4.000E+13	.000	.00
CN+H2O<=>HCN+OH	8.000E+12	.000	7460.00
CN+O2<=>NCO+O	6.140E+12	.000	-440.00
CN+H2<=>HCN+H	2.950E+05	2.450	2240.00
NCO+O<=>NO+CO	2.350E+13	.000	.00
NCO+H<=>NH+CO	5.400E+13	.000	.00
NCO+OH<=>NO+H+CO	0.250E+13	.000	.00
NCO+N<=>N2+CO	2.000E+13	.000	.00
NCO+O2<=>NO+CO2	2.000E+12	.000	20000.00
NCO+M<=>N+CO+M	3.100E+14	.000	54050.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
NCO+NO<=>N2O+CO	1.900E+17	-1.520	740.00
NCO+NO<=>N2+CO2	3.800E+18	-2.000	800.00
HCN+M<=>H+CN+M	1.040E+29	-3.300	126600.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCN+O<=>NCO+H	2.030E+04	2.640	4980.00
HCN+O<=>NH+CO	5.070E+03	2.640	4980.00
HCN+O<=>CN+OH	3.910E+09	1.580	26600.00
HCN+OH<=>HOCN+H	1.100E+06	2.030	13370.00
HCN+OH<=>HNCO+H	4.400E+03	2.260	6400.00
HCN+OH<=>NH2+CO	1.600E+02	2.560	9000.00
H+HCN(+M)<=>H2CN(+M)	3.300E+13	.000	.00
LOW / 1.400E+26 -3.400 1900.00/			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
H2CN+N<=>N2+CH2	6.000E+13	.000	400.00
C+N2<=>CN+N	6.300E+13	.000	46020.00
CH+N2<=>HCN+N	3.120E+09	0.880	20130.00

Annexes

CH+N2(+M)<=>HCNN(+M)	3.100E+12	.150	.00
LOW / 1.300E+25 -3.160 740.00/ TROE/ .6670 235.00 2117.00 4536.00 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ 1.0/			
CH2+N2<=>HCN+NH	1.000E+13	.000	74000.00
CH2(S)+N2<=>NH+HCN	1.000E+11	.000	65000.00
C+NO<=>CN+O	1.900E+13	.000	.00
C+NO<=>CO+N	2.900E+13	.000	.00
CH+NO<=>HCN+O	4.100E+13	.000	.00
CH+NO<=>H+NCO	1.620E+13	.000	.00
CH+NO<=>N+HCO	2.460E+13	.000	.00
CH2+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00
CH2+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH2(S)+NO<=>H+HNCO	3.100E+17	-1.380	1270.00
CH2(S)+NO<=>OH+HCN	2.900E+14	-.690	760.00
CH2(S)+NO<=>H+HCNO	3.800E+13	-.360	580.00
CH3+NO<=>HCN+H2O	9.600E+13	.000	28800.00
CH3+NO<=>H2CN+OH	1.000E+12	.000	21750.00
HCNN+O<=>CO+H+N2	2.200E+13	.000	.00
HCNN+O<=>HCN+NO	2.000E+12	.000	.00
HCNN+O2<=>O+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+OH<=>H+HCO+N2	1.200E+13	.000	.00
HCNN+H<=>CH2+N2	1.000E+14	.000	.00
HNCO+O<=>NH+CO2	9.800E+07	1.410	8500.00
HNCO+O<=>HNO+CO	1.500E+08	1.570	44000.00
HNCO+O<=>NCO+OH	2.200E+06	2.110	11400.00
HNCO+H<=>NH2+CO	2.250E+07	1.700	3800.00
HNCO+H<=>H2+NCO	1.050E+05	2.500	13300.00
HNCO+OH<=>NCO+H2O	3.300E+07	1.500	3600.00
HNCO+OH<=>NH2+CO2	3.300E+06	1.500	3600.00
HNCO+M<=>NH+CO+M	1.180E+16	.000	84720.00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
HCNO+H<=>H+HNCO	2.100E+15	-.690	2850.00
HCNO+H<=>OH+HCN	2.700E+11	.180	2120.00
HCNO+H<=>NH2+CO	1.700E+14	-.750	2890.00
HOCN+H<=>H+HNCO	2.000E+07	2.000	2000.00
HCCO+NO<=>HCNO+CO	0.900E+13	.000	.00
CH3+N<=>H2CN+H	6.100E+14	-.310	290.00
CH3+N<=>HCN+H2	3.700E+12	.150	-90.00
NH3+H<=>NH2+H2	5.400E+05	2.400	9915.00
NH3+OH<=>NH2+H2O	5.000E+07	1.600	955.00
NH3+O<=>NH2+OH	9.400E+06	1.940	6460.00
NH+CO2<=>HNO+CO	1.000E+13	.000	14350.00
CN+NO2<=>NCO+NO	6.160E+15	-0.752	345.00
NCO+NO2<=>N2O+CO2	3.250E+12	.000	-705.00
N+CO2<=>NO+CO	3.000E+12	.000	11300.00
O+CH3=>H+H2+CO	3.370E+13	.000	.00
O+C2H4<=>H+CH2CHO	6.700E+06	1.830	220.00
O+C2H5<=>H+CH3CHO	1.096E+14	.000	.00

Annexes

OH+HO2<=>O2+H2O	0.500E+16	.000	17330.00
DUPLICATE			
OH+CH3=>H2+CH2O	8.000E+09	.500	-1755.00
CH+H2 (+M) <=>CH3 (+M)	1.970E+12	.430	-370.00
LOW/ 4.820E+25 -2.80 590.0 /			
TROE/ .578 122.0 2535.0 9365.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
CH2+O2=>2H+CO2	5.800E+12	.000	1500.00
CH2+O2<=>O+CH2O	2.400E+12	.000	1500.00
CH2+CH2=>2H+C2H2	2.000E+14	.000	10989.00
CH2(S) +H2O=>H2+CH2O	6.820E+10	.250	-935.00
C2H3+O2<=>O+CH2CHO	3.030E+11	.290	11.00
C2H3+O2<=>HO2+C2H2	1.337E+06	1.610	-384.00
O+CH3CHO<=>OH+CH2CHO	2.920E+12	.000	1808.00
O+CH3CHO=>OH+CH3+CO	2.920E+12	.000	1808.00
O2+CH3CHO=>HO2+CH3+CO	3.010E+13	.000	39150.00
H+CH3CHO<=>CH2CHO+H2	2.050E+09	1.160	2405.00
H+CH3CHO=>CH3+H2+CO	2.050E+09	1.160	2405.00
OH+CH3CHO=>CH3+H2O+CO	2.343E+10	0.730	-1113.00
HO2+CH3CHO=>CH3+H2O2+CO	3.010E+12	.000	11923.00
CH3+CH3CHO=>CH3+CH4+CO	2.720E+06	1.770	5920.00
H+CH2CO (+M) <=>CH2CHO (+M)	4.865E+11	0.422	-1755.00
LOW/ 1.012E+42 -7.63 3854.0 /			
TROE/ 0.465 201.0 1773.0 5333.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+CH2CHO=>H+CH2+CO2	1.500E+14	.000	.00
O2+CH2CHO=>OH+CO+CH2O	1.810E+10	.000	.00
O2+CH2CHO=>OH+2HCO	2.350E+10	.000	.00
H+CH2CHO<=>CH3+HCO	2.200E+13	.000	.00
H+CH2CHO<=>CH2CO+H2	1.100E+13	.000	.00
OH+CH2CHO<=>H2O+CH2CO	1.200E+13	.000	.00
OH+CH2CHO<=>HCO+CH2OH	3.010E+13	.000	.00
CH3+C2H5 (+M) <=>C3H8 (+M)	.9430E+13	.000	.00
LOW/ 2.710E+74 -16.82 13065.0 /			
TROE/ .1527 291.0 2742.0 7748.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+C3H8<=>OH+C3H7	1.930E+05	2.680	3716.00
H+C3H8<=>C3H7+H2	1.320E+06	2.540	6756.00
OH+C3H8<=>C3H7+H2O	3.160E+07	1.800	934.00
C3H7+H2O2<=>HO2+C3H8	3.780E+02	2.720	1500.00
CH3+C3H8<=>C3H7+CH4	0.903E+00	3.650	7154.00
CH3+C2H4 (+M) <=>C3H7 (+M)	2.550E+06	1.600	5700.00
LOW/ 3.00E+63 -14.6 18170. /			
TROE/ .1894 277.0 8748.0 7891.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			
O+C3H7<=>C2H5+CH2O	9.640E+13	.000	.00
H+C3H7 (+M) <=>C3H8 (+M)	3.613E+13	.000	.00
LOW/ 4.420E+61 -13.545 11357.0 /			
TROE/ .315 369.0 3285.0 6667.0 /			
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/			

Annexes

H+C3H7<=>CH3+C2H5	4.060E+06	2.190	890.00
OH+C3H7<=>C2H5+CH2OH	2.410E+13	.000	.00
HO2+C3H7<=>O2+C3H8	2.550E+10	0.255	-943.00
HO2+C3H7=>OH+C2H5+CH2O	2.410E+13	.000	.00
CH3+C3H7<=>2C2H5	1.927E+13	-0.320	.00
END			